



TITLE:

# $C^*$ 代数法による量子複合系におけるコヒーレント伝導の理論的解析

AUTHOR(S):

高橋, 順子

---

CITATION:

高橋, 順子.  $C^*$ 代数法による量子複合系におけるコヒーレント伝導の理論的解析. 物性研究 2006, 86(6): 753-811

ISSUE DATE:

2006-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/110575>

RIGHT:

**修士論文 (2005年度)****C\* 代数法による量子複合系におけるコヒーレント伝導の理論的解析**

早稲田大学大学院理工学研究科  
物理学及応用物理学専攻 修士課程 2 年  
高橋 順子<sup>1</sup>

**目 次**

<b>1 序論</b>	755
1.1 本研究の背景と課題	755
1.2 メゾスコピック系の電気伝導現象	756
1.3 本論文の構成	763
<b>2 量子複合系における非平衡 Fano 効果</b>	763
2.1 C* 代数法	763
2.2 AB リングに量子ドットを埋め込んだ複合系	765
2.3 漸近場の演算子と非平衡定常状態の構成法	766
2.4 非平衡電流特性	767
2.5 非平衡電流ゆらぎ	771
2.6 非平衡久保公式	774
2.7 相対エントロピーと熱力学第二法則	776
2.8 第 2 章のまとめ	777
<b>3 量子複合系における非平衡 Fano-Kondo 効果</b>	777
3.1 Slave-Boson 法	777
3.2 クーロン相互作用を取り入れた量子複合系	778
3.3 非平衡平均場法と非平衡定常状態	780
3.4 Fano-Kondo 効果	783
3.5 コンダクタンスのゼロバイアス極大・極小	792
3.6 近藤温度	793
3.7 クーロン相互作用と Fano 因子	794
3.8 第 3 章のまとめ	796
<b>4 結論</b>	797
<b>付録 A Fano 効果</b>	799
<b>付録 B Aharonov-Bohm 効果</b>	801
<b>付録 C 漸近場の導出方法</b>	801
<b>付録 D 非平衡定常状態への C* 代数法的アプローチ</b>	803
<b>付録 E C*代数法の応用—カーボンナノチューブ系への適用</b>	804

<sup>1</sup>E-mail: junchi@ruri.waseda.jp

## 概要

本研究は無限量子系を扱う上で有用な手法である  $C^*$  代数法を利用して、量子ドットと Aharonov-Bohm (AB) リングを組み合わせた複合系における電気伝導、特に Fano 効果、近藤効果を線形応答領域から非平衡性の強い領域にわたって理論的に調べたものである。

まず最初に、電子間相互作用を考慮しない場合について考察した。 $C^*$  代数の方法を用いて、複合系における非平衡定常状態を厳密に構成し、定常状態では相対エントロピー生成量が常に正であること、量子ドットから十分遠方の領域では熱平衡性が回復することを示した。次に、線形応答領域における Fano 効果を調べ、既知の結果を再現した。更に非平衡領域での Fano 共鳴、Aharonov-Bohm 振動 (AB 振動)、電流ゆらぎと Fano 共鳴ピークの関係性を調べた。特に伝導率の共鳴ピークに干渉の効果が観測されない場合でも、電流ゆらぎには現れることを見出した。また、久保公式を非平衡系に拡張し補正項が生じることを示した。以上の考察から、 $C^*$  代数の方法は、メソスコピック系における輸送現象を扱う上で非常に有用であることを示した。

次に、量子ドット内のクーロン相互作用の影響を考えた。ドット内のクーロン相互作用が重要となる系では Fano 効果と同時に近藤効果が現れる。これは Fano-Kondo 効果と呼ばれる。本研究では  $C^*$  代数法に加え Kotliar と Ruckenstein が提案した finite- $U$  slave-boson mean-field 法を用いて強相関系での電気伝導度を計算した。この方法は強相関系の研究によく使用される方法であり、今回考察した系でも、数値繰り込み群の方法で得られた線形応答領域での Fano-Kondo 効果、AB 振動の振る舞いを再現することに成功した。つまり、量子ドット系の電気伝導度の計算においても slave-boson mean-field 法は有用である。更にこの方法を用い、非平衡領域において Fano-Kondo 形状が壊されていく過程を考察し、バイアス電圧によって共鳴ピークが二つに分裂する傾向が見られることを示した。また、コンダクタンスのバイアス依存性を調べ、ゼロバイアスに極大ピークが生じることを示した。このゼロバイアスピークは近藤効果に特徴的であり、実験結果をよく再現する。更に連続状態と離散状態の干渉効果がコンダクタンスに寄与することによって、ゼロバイアスにおいてディップ構造を示すことを理論的に予測した。最後に、Fano 因子を計算し、ドット単独の場合では既知の振る舞いを再現し、複合系の場合は干渉効果により大きく振る舞いが変わることを示した。以上から電子間相互作用を考慮した場合でも、絶対零度、低バイアス領域において slave-boson mean-field 法は非平衡系を扱うのに有用であることを示した。

# 1 序論

## 1.1 本研究の背景と課題

ミクロ系とマクロ系の間属するメゾスコピック系の電子輸送現象の研究は、近年の微細加工技術の発展により非常に活発に行なわれている。メゾスコピック系の輸送現象において、電子の波動性や粒子性に起因した、古典力学の範囲では説明することができない現象が発見されている。その中でも特に量子ドットを介する電気伝導特性は、多くの研究者の関心、注目を集めており、後述する Fano 効果や近藤効果などの他分野で知られていた現象が観測されている。

様々な量子ドット系の中で、ドットを片側の腕だけに埋め込んだ Aharonov-Bohm リング (AB リング) 複合系は、電気伝導過程において部分的に電子のコヒーレンス性が保たれる部品として知られている [1]。電子が一部コヒーレンス性を保って系を伝導するために、連続準位と離散準位とが干渉を起こし伝導度に非対称な共鳴散乱形状が現れる Fano 効果が観測されている。Fano 効果 [2] は元来、分光学の分野で原子の光吸収スペクトルが非対称形状を示す現象として知られていたが、2000 年以降、量子ドット系において観測されるようになり、離散準位と連続準位が共存する系において普遍的に発現することが明らかになった。Fano 効果の発現には電子のコヒーレンス性が非常に重要な要素となっており、後述する共鳴ピーク間の位相シフトやコンダクタンスが磁場に対して振動するという Aharonov-Bohm 振動 (AB 振動) と絡めて議論されている。

量子ドットにおける電子間相互作用の寄与が大きくなると、Fano 効果のみならず近藤効果も発現する。量子ドット系での近藤効果はバルク金属と異なり、ドット内の奇数個の孤立スピンの伝導電子とスピン一重項を組むことによって、本来は伝導が抑制されている領域で伝導度が上昇する現象として観測されている。これはまた、ドット内のスピン反転により生じるデコヒーレンスを回復させる機構とも考えられている [3, 4]。量子ドットを介する経路の他に連続準位が存在する場合は、Fano 効果により近藤効果が抑えられることが予測されている [5]。近藤効果に特徴的な物理現象と干渉効果である Fano 効果との関係、特に非平衡領域での振舞いは十分には理解されていない。

本研究では、量子ドットを含む AB リング複合系の電気伝導を線形応答領域から非平衡性の強い領域にわたって調べることを目的とした。対象とするメゾスコピック系と電極のサイズが大きく違うため、全系を無限量子系として扱った。まず初めに電子間相互作用を考慮しないモデルについて非平衡定常状態を C\* 代数の方法で構成し、線形応答領域での Fano 共鳴ピークを導出し、電流ゆらぎにおける干渉効果の影響を調べた。そして、非平衡性が強い領域における Fano 効果、AB 振動、電流ゆらぎの振る舞いを考察した。次に finite- $U$  slave-boson mean-field 法を用い、クーロン相互作用の効果を取り入れた。線形応答領域での Fano-Kondo 効果、AB 振動を導出し、他のグループが数値繰り込み群の方法 (NRG 法) を用いて得た結果 [5] と比較検討した。更に Fano-Kondo 効果のバイアス電圧依存性を調べ、連続準位と離散準位による干渉効果がコンダクタンスのバイアス依存性及び電流ゆらぎの Fano 因子に及ぼす影響について調べた。

## 1.2 メゾスコピック系の電気伝導現象

この節では、本研究の課題に関係の深いメゾスコピック系に特徴的な電気伝導現象についてまとめておく。

### 1.2.1 量子ドットにおけるクーロンブロッケード

半導体微小領域に電子を閉じ込めたものを量子ドットと言う。離散エネルギーの殻構造やフント則などが見られるという点で電子状態が通常の原子と類似していることから、量子ドットは人工原子とも呼ばれる。微細加工技術の発展により、例えば磁場などの量子ドットの環境パラメータを制御できるため、ドットに発現する物理現象を様々な角度から調べることが可能である。この量子ドットを介する電気伝導現象では、ドット単体の0次元性に由来する電子閉じ込め効果と単電子帯電効果が顕著に現れる。図1のように量子ドットがトンネル接合を介して左右リード（電極）につながれており、静電エネルギーを変化させるためにゲート電極が取り付けられている系、すなわち単電子トランジスタにおける電気伝導を考える。まず、量子ドットのサイズが有限であるためにそれに閉じ込められた電子のエネルギー準位が離散化し、その間隔が  $k_B T$  ( $k_B$  はボルツマン定数、 $T$  は温度) を上回ると電子のトンネリングはドット内の一つの離散準位を介して行われるようになる。これは原子で言うと、特定の軌道のみを介して電気伝導が起こることを意味している。更に、十分低温でかつドットとリードの静電容量  $C$  が非常に小さい場合、電子を量子ドットに移すことによって生じる静電エネルギー  $e^2/2C$  の寄与を無視することができなくなる。静電エネルギーが系の温度より大きくなると、その結果電子のトンネリングは禁止されてしまう（クーロンブロッケード）。この時、電子を1つずつ量子ドットに追加するためには、ゲート電圧を掃引することによって量子ドットの準位を下げる必要がある。量子ドットの準位と左右リードのフェルミエネルギーが一致した時に電子はドットを通過することができ、電気伝導に振動が現れる（クーロン振動）。

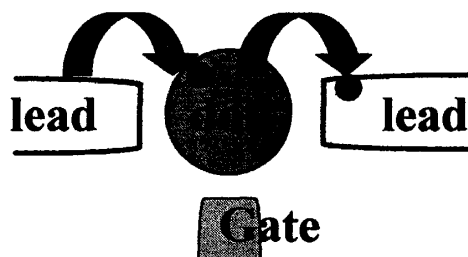


図1: 量子ドットにおける電気伝導。トンネル障壁を介して外部のリードへ電子が流れる。ゲート電圧によってドットの静電ポテンシャルを変化させ、電子を一つずつドットに追加させることができる。

図2に実験において観測されたクーロン振動の様子を示す [6]。ゲート電圧の関数として伝導度をプロットしたものであり、下のグラフには典型的なクーロン振動があらわれている。伝導度が抑制されている領域においてクーロンブロッケードが生じている。クーロン振動の周期は量子ドット内の離散エネルギー準位と帯電エネルギーを反映しており、この実験ではピーク間隔は若干不規則になっている。量子ドットとリードが接合されると、電子はある有限の寿命（寿命幅はドットとリードの結合の強さの二乗に比例）を持ち、その時間だけ離散準位にとどまった後に

リードに流れていく。ゲート電圧を掃引することによってこの現象を繰り返すので、伝導度はある間隔を置いたピークの集まりとして観測されている。上の曲線は量子ドットを介する経路とは別に、電極同士を直接結合された経路（今後、アームと呼ぶ）が加わった場合の伝導度を示しており、クーロン振動のピークが非対称となっている。これは後に説明するが、二つの経路を通る電子の干渉効果、いわゆる Fano 効果が発現しているためである。この実験では、量子ドット内に多数の準位が存在するために図 2 において多数のクーロンピークが現れている。

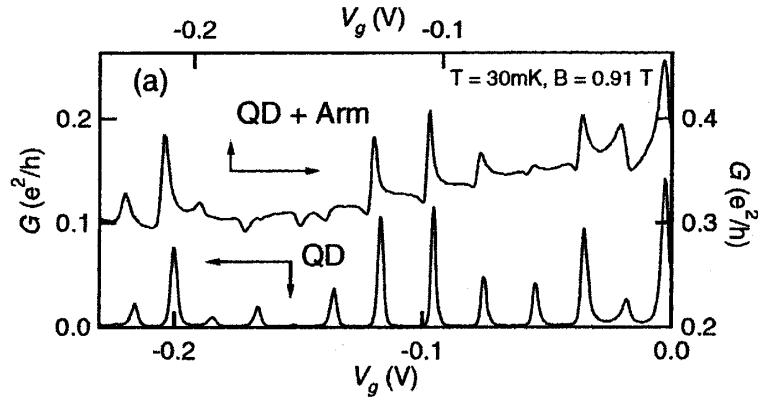


図 2: 文献 [6] から抜粋した実験結果（磁場 0.91T、温度 30mk）。通常のクーロン振動が観測されている（下）。量子ドットを介する経路にアームを取り付けた場合（リング系の場合）、クーロン振動は離散準位と連続準位が結合することによって非対称になる（上）。

### 1.2.2 ランダウアー公式

メゾスコピック系の電気伝導を考察する際にはランダウアー公式がよく用いられる。その導出方法をまとめておく [7]。電気伝導に関する一般的な公式である久保公式の定式化のすぐ後にランダウアー公式が発表され [8, 9]、線形応答範囲で非弾性散乱過程がない場合には、久保公式と等価であることが知られている。

#### (i) 二端子ランダウアー公式

ここでは一番簡単な二端子の場合の公式を導出する。図 3 の左図のように試料  $S$  はリード線  $L_1, L_2$  を介して十分大きな電極  $Re_L, Re_R$  とつながれており試料中では弾性散乱のみがあると仮定する。更にリード線の中では電子の反射はないと仮定し、電子間相互作用や温度の効果も考慮しない。左右の電極の化学ポテンシャルを  $\mu_L, \mu_R$  とし、 $\mu_L - \mu_R = eV$  だけ電圧がかかっているとする。左電極  $Re_L$  から流れる電子はそのままリード線  $L_1$  に流れ込むと仮定し、エネルギーが  $\mu_R$  より下の電子は伝導に寄与しないと考える。リード線  $L_1$  の中ではエネルギー  $\mu_L$  以下の状態は全て占有されており、更に二つのリード線と試料中ではエネルギー  $\mu_R$  以下の状態は電子により占有されている。電子のエネルギーが  $\varepsilon(p_r) = \mu_r (r=L, R)$  となる運動量を  $p_r$  とすると、 $\mu_L$  及び  $\mu_R$  の間の状態数はスピンあたり  $(p_L - p_R)/2\pi\hbar$  である。また、線形応答範囲では

$$\mu_L - \mu_R = \frac{d\varepsilon(p_L)}{dp_L} (p_L - p_R) \quad (1)$$

と表されるのでリード線  $L_1$  に流れ込む電流  $J_1$  は

$$J_1 = 2e \frac{(p_1 - p_2)}{2\pi\hbar} \frac{d\varepsilon(p_L)}{dp_L} = 2e \frac{(\mu_L - \mu_R)}{h} \quad (2)$$

と計算される。リード線と試料の透過確率が一定値  $T$  をとると仮定すると、リード線から供給された電子のうち  $T$  の割合だけが電流に寄与するので、リード線  $L_2$  を通って電極  $\text{Re}_R$  に到達する電流は

$$J = 2e \frac{(\mu_L - \mu_R)T}{h} = \frac{2e^2}{h} TV \quad (3)$$

となる。化学ポテンシャルとバイアス電圧の関係よりコンダクタンスは

$$G = \frac{dJ}{dV} = \frac{2e^2}{h} T \quad (4)$$

と記述できる。これがもっとも簡単な場合のランダウアー公式である。

次にリード線が有限の太さをもっている場合について考える。その場合にはリード線内に横方向の運動の自由度に伴うモードが形成され、電子が試料を透過する確率は、

$$\sum_{j=1}^{\infty} t_{ji} t_{ji}^* \quad (5)$$

と表される。ここで、 $t_{ji}$  は  $i$  番目のモードのフェルミ準位に存在している電子が、試料を通過後に  $j$  番目のモードに散乱される確率振幅である。 $N$  より大きい数のモードは  $\mu_L$  を超えてしまうとすると、 $N$  番目までのモードに存在する電子が電流に寄与すると考えられるので、コンダクタンスは

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{\infty} t_{ji} t_{ji}^* = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(t^\dagger t) = \frac{2e^2}{h} \sum_{i=1}^N T_i \quad (6)$$

と拡張できる。ここで  $t$  は  $t_{ij}$  を要素とする行列であり、 $i, j > N$  の時は  $t_{ij} = 0$  をとる。以上見てきたように二端子測定を用いたランダウアー公式の導出は、直感的に理解しやすいものとなっている。ランダウアー公式で与えられるコンダクタンスの式を直接、実験的に検証したものに、コンダクタンスの量子化現象がある [10]。コンダクタンスはゲート電圧の関数としてステップ状に増加している様子が見られている。電子の入っているモード数が一つずつ変化すると、コンダクタンスが  $2e^2/h$  の単位でステップ状に変化しており、まさにランダウアー公式を実験的に示したと考えられる。二端子測定の場合は、左右電極に電圧差が生じた場合のコンダクタンスを測定している。試料そのものの抵抗を測るためには以下のような別の測定法が提案されている。

#### (ii) 四端子ランダウアー公式

図3の右図のように電流を流すための電極以外に、電圧を測定するための電極電圧端子を用意する。それぞれリード線の化学ポテンシャルに相当するものを  $\mu_A$ 、 $\mu_B$  と定義する。リード線は電圧端子を通して電極につながっていると仮定すれば化学ポテンシャルを定義でき、外部からの電圧源等を操作することにより化学ポテンシャルを変化させることができる。電極、リード線の化学ポテンシャルの関係は  $\mu_R \leq \mu_B \leq \mu_A \leq \mu_L$  と仮定する。リード線  $L_1$  の中の電子状態で  $\mu_R$  よりエネルギーの低い電子は全て満たされている。 $\mu_L$  と  $\mu_R$  の間のものは右方向の速度を持つ電子により透過確率  $T$  で流れるのに対して、逆方向を持つ電子は試料  $S$  によって反射されるのでその反射確率を  $R = 1 - T$  とすると全体の  $R$  倍で電子が流れる状況である。リード線の化学ポテンシャルについて、リード線  $L_1$  に接触させる端子の化学ポテンシャルを  $\mu_A$  とすると、端子の中の

電子状態は  $\mu_A$  以下の電子は全て満たされており、 $\mu_R < \mu_A < \mu_L$  であれば  $\mu_A$  より高いエネルギーを持つ電子はリード線から端子へと流れ、低い電子は逆に流れることとなる。後者はリード線から端子へホールが流れると解釈することができ、リード線・端子間の電流の合計が 0 になるためには、 $\mu_L$  と  $\mu_A$  の間のエネルギーを持つ電子数と逆に流れる  $\mu_R$  と  $\mu_A$  の間のエネルギーをもつホール数が等しくなればよい。このような条件は、 $D/2$  を一方向の速度あたりの状態密度とすると、以下のように記述される。

$$\frac{D}{2}(\mu_L - \mu_A)(1 + R) = \frac{D}{2}(\mu_A - \mu_R)T \quad (7)$$

リード線  $L_2$  に接触した化学ポテンシャルを  $\mu_B$  とすると、同様にして

$$\frac{D}{2}(\mu_L - \mu_B)T = \frac{D}{2}(\mu_B - \mu_R)(2 - T) \quad (8)$$

という条件が得られる。これらの二式より

$$\mu_A - \mu_B = (\mu_L - \mu_R)(1 - T) \quad (9)$$

という関係が得られ、コンダクタンス  $G$  (四端子) は  $\tilde{V} = (\mu_A - \mu_B)/e$  とすると、

$$G(\text{四端子}) = \frac{G(\text{二端子})}{1 - T} = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{1 - T} \quad (10)$$

と求められる。この場合は試料の透過率が  $T = 1$  の時、コンダクタンスは無限大となり、試料そのものの抵抗を測っていると考えられる。以上がランダウアーの公式の基本的な導出である。

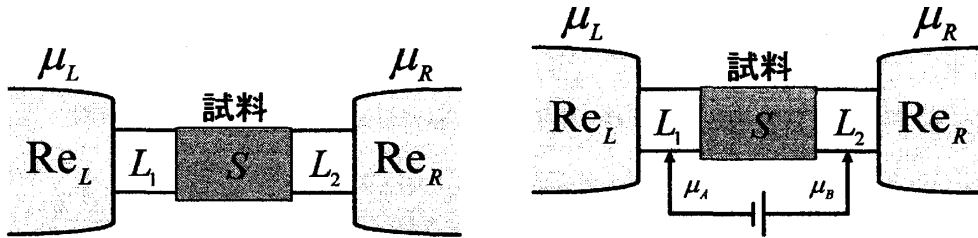


図 3: ランダウアー公式を導くために使用したモデル。試料  $S$  がリード線  $L_1$ 、 $L_2$  を介して化学ポテンシャル  $\mu_L$ 、 $\mu_R$  をもつ電極  $\text{Re}_L$ 、 $\text{Re}_R$  とつながれている。左図：二端子法を用いた場合の測定方法。右図：四端子法を用いた場合の測定方法。左リード線と右リード線の上に電極電圧端子を用意する（それぞれ化学ポテンシャルは  $\mu_A$  と  $\mu_B$ ）。



### 1.2.3 AB リング系における Fano 効果

Fano 効果 [2] は連続準位の中に埋め込まれた離散準位に起因する共鳴散乱現象であり、共鳴ピークが非対称形状を示すことで知られている。Fano のオリジナルの論文については付録 A にまとめた。Fano 効果はメゾスコピック系の分野では、量子ドットを埋め込んだ AB リング系などで観測されており、ドット内の離散状態とアーム上の連続状態を通過する電子が干渉を起こすことによって伝導度に非対称な形状があらわれる [6, 11]。量子ドットを埋め込んだ AB リング系は電子が一部コヒーレンスを保って伝導するため、電子の波動性と粒子性が見られる系であると言われている。この系において、Fano 効果による非対称ピークは磁場などの外部パラメータによって制御可能であり、更に後述する AB 振動や近藤効果と Fano 効果が共存することにより多くの興味深い輸送現象が報告されている。ここでは非対称ピークと磁場の関係、及び Fano パラメータについて考えていく。

実験において、磁場を掃引することにより、非対称共鳴ピークの裾の引き方が AB 振動の周期と同程度で反転することが観測されている [6]。このことは以下のような二次の摂動計算からも定性的に理解することができる。電子が左電極から右電極に通過する際のスピンあたりの行列要素を  $\tilde{T}_\sigma$  とする。ドット、電極間の飛び移りを表す行列要素を  $\gamma$ 、電極のフェルミエネルギーを  $\varepsilon_F$ 、量子ドットの準位を  $\varepsilon_\sigma$  とすると、 $\tilde{T}_\sigma$  は二次の摂動計算で  $\tilde{T}_\sigma = |\gamma|^2 / (\varepsilon_F - \varepsilon_\sigma)$  と求めることができる。伝導度はランダウアーの公式より  $G \sim |\gamma|^2 \sim |\gamma + \tilde{\gamma} e^{i\varphi}|^2$  と表される。ここで  $\gamma$  は量子ドットを通る電子の結合の強さ、 $\tilde{\gamma}$  は両電極間をダイレクトに通過する電子の結合の強さである。共鳴ピークが生じる付近、 $\varepsilon_F \approx \varepsilon_\sigma$  の範囲で  $\varepsilon_F < \varepsilon_\sigma$  では  $\varphi = \pi$  の時に伝導度は最大値をとり、反対に  $\varepsilon_F > \varepsilon_\sigma$  では  $\varphi = 0$  の時に最大値をとる。よって  $\varphi = 0$  と  $\varphi = \pi$  の時では共鳴ピークの最大値をとる場所が異なるために、ピークの形状が磁場で反転の様子がみられる。これは、磁場により両経路の位相差が変化するために起こると考えられる。実験ではすべての磁場領域でこの非対称形状のピークが観測されるわけではなく、特定の磁場領域のみで観測されている [6]。更に、AB 位相が  $\varphi = 0$ 、または  $\varphi = \pi$  の時は、非対称形状の共鳴ピークが観測されているが、 $\varphi = \pi/2$  では Fano 効果が起きているにも関わらず対称な共鳴ピーク構造が現れていることが報告されている。両経路の干渉効果が生じている領域でも、ほとんど対称の共鳴ピークが生じることは大変興味深い。

このように非対称共鳴ピークの形状が磁場によって反転することは、Fano のパラメータ  $q$  から理解することができる。Fano のパラメータは非対称形状を特徴付ける量と定義されており、Fano のオリジナルの論文では実数とされていたが、磁場により系の時間反転対称性が破られる場合には複素数に拡張する必要があることが指摘された [6, 12]。伝導度と Fano パラメータの関係は次式のように表される。

$$G(\varepsilon) \propto \frac{|\varepsilon + q|^2}{1 + \varepsilon^2} \quad (11)$$

$\varepsilon$  はエネルギーに関係する量を表し、 $q$  は Fano の非対称パラメータである。共鳴ピークの形状はこのパラメータ  $q$  によって変化し、 $q = 0$  では左右対称なディップ構造を示し、 $|q| = \infty$  では左右対称な Breit-Wigner 型の共鳴ピークを示す。

図 4 に第 2 章で議論する線形応答領域での伝導度を、量子ドットの準位に対してプロットしたものを示す。量子ドットの準位が左右電極のフェルミエネルギーを通過する際に非対称の共鳴ピークが生じており、実験で観測された伝導度 [6] と同様に非対称形状の裾の向きが磁場によって変化する様子が見られる。第 2 章では導出した Fano パラメータについても述べる。

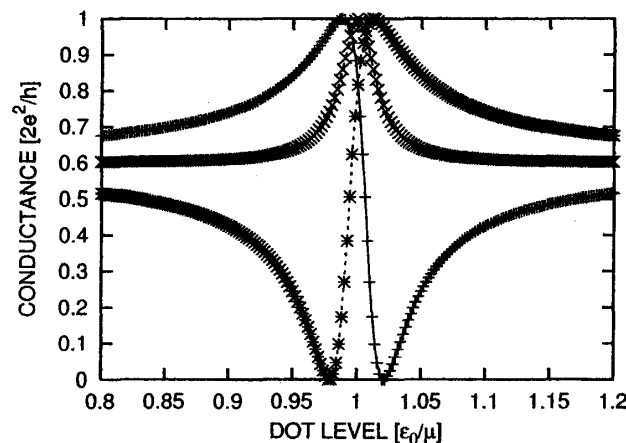


図 4: 第 2 章で計算した線形応答領域の伝導度の数値計算結果 (近藤効果を考慮しない場合)。磁場によって伝導度の裾の方向が異なる:  $+$ :  $\varphi = 0$ ,  $\times$ :  $\varphi = \pi/2$ ,  $*$ :  $\varphi = \pi$ 。

#### 1.2.4 近藤効果、Fano-Kondo 効果

##### (i) 近藤効果

金属の電気抵抗は一般に、温度が下がるとフォノン散乱が抑えられるために減少する。しかし 1930 年に、磁性合金において電気抵抗が低温になるにつれて抵抗が上昇し、かつ抵抗温度曲線に極小が現れることが発見された。磁性不純物を少量含む金属でごく一般にこのような現象が見られることがわかり、発見から約 30 年後の 1964 年に局在磁気モーメントと伝導電子のスピンとの sd 相互作用による二次の散乱効果によるものであると理論的に説明がなされた。これが有名な近藤の理論である [13]。この不純物における局所電子相関効果は近藤効果と言われており、希薄磁性合金に関わらず、連続スペクトルをもつ電子状態と、電子相関が強い局在した電子状態が存在する系において普遍的に発現すると考えられている。実際、微細加工技術の発展により、量子ドット等のメソスコピック系の部品を自在に扱えるようになってから、量子ドット系における近藤効果が実験で観測され [14, 15, 16]、ついに十分に低温で伝導度がユニタリー極限値に飽和することが報告された [17]。その他にも近藤効果に関する研究は実験、理論ともに多数行われており、準位縮退が存在する場合の近藤効果 (Singlet-Triplet 近藤効果 [18]、Doublet-Doublet 近藤効果 [19])、人工分子における近藤効果 [20, 21]、非平衡近藤効果 [22, 23, 24, 25, 26]、RKKY 相互作用と近藤効果の競合 [27, 28, 29]、Fano-Kondo 効果 [5, 30, 31, 32, 33](後述する) など、様々な興味深い現象が調べられている。

量子ドットにおける近藤効果は、不純物を含む磁性体におけるそれとは異なる様相を示す。温度が近藤温度と呼ばれる特性温度以下になると量子ドット中の局在スピンの伝導電子スピンとスピン-重項を形成することによって、高次のトンネル効果が生じ本来クーロンブロックで伝導が抑制されている領域において伝導度が増大する。つまり電気伝導度の温度曲線に極小があらわれる。近藤状態が形成される時は、量子ドット内の電子スピンの奇数個の時、つまりスピン  $S_z = 1/2$  の時であり、この時量子ドット内のスピンは磁性不純物とみなすことができる。量子ドットのトンネル過程はドット中のスピンの  $z$  成分を  $S_z = -1/2, 1/2$  と反転させながら起こるため、時間平均をとると  $S_z = 1/2$  であったものが  $S_z = 0$  に変化する。つまり、磁性不純物はスピン相関によって遮蔽されると考えられる。ドットにゲート電圧を印加し量子ドットの準位を上下させると、1.2.1 節で説明したクーロン振動によってドット内の電子数を一つずつ変化させることができる。このクーロン振動の観点から見ると、電子数が奇数個になるたびに伝導度が上昇し、ユニ

タリー極限の値 ( $G = 2e^2/h$ ) で飽和する。実際、伝導度がクーロン振動のピーク値より高くなり、二つのクーロンピークが合体して一つの大きなプラトーを持つピークになることが観測されている [17]。

伝導度のゼロバイアス極大も近藤効果に特徴的な現象である [17, 34]。これはクーロン振動の谷領域にゲート電圧を固定し、バイアス電圧の関数として伝導度を調べると、ゼロバイアスにおいて急激なピークが発現する現象である。この現象はフェルミ準位において量子ドットの状態密度に鋭いピーク（近藤ピーク）が存在することに由来する。低温では電極と量子ドットの伝導過程において、電子のコヒーレンス性が保たれるために近藤効果が起こるが、有限バイアス電圧を印加することにより左右のフェルミ準位に差が生じるため高次のトンネルのコヒーレンスが破れ、近藤ピークが減少する。そのため、ゼロバイアスにおいて伝導度は極大値をもつと考えられる。また、バイアス電圧が 0 の付近では、近藤温度近くで伝導度は温度  $T$  の対数  $\log T$  に比例する。近藤温度とは近藤効果が生じる、一つの目安とされている量である。近藤温度以下では先ほど述べたクーロンブロッケード領域における伝導度の上昇が観測される。

近藤温度  $T_k$  は左右の電極と量子ドットのトンネル結合が等しい場合 ( $\Gamma = \Gamma_L = \Gamma_R$ ) には、

$$T_k = \frac{1}{2} \left( \frac{\Gamma U}{2} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{\pi \epsilon_0 (U + \epsilon_0)}{\Gamma U} \right\} \quad (12)$$

で与えられる [35]。ここで、 $\epsilon_0$  はフェルミ面から測ったドットのエネルギー準位であり、 $U$  はクーロン相互作用エネルギーである。上式の近藤温度は指数関数の引数に大きく依存し、 $\epsilon_0(U + \epsilon_0) < 0$  なのでその値が小さい程、近藤温度は高くなると予想される。有限温度の伝導度が近藤温度により

$$G/G_0 = \left\{ \frac{T_k^2}{(T^2 + T_k^2)} \right\}^s \quad (13)$$

と表されることが理論計算により導出されている [36]。上式において  $T'_k = T_k(2^{1/s} - 1)^{-1/2}$  であり、 $G_0 = 2e^2/h$  である。 $s = 0.29$  とした場合の上式とクーロンピークの関係から、クーロン振動の谷（近藤効果によって伝導度が上昇する領域）を中心として、近藤温度が二次曲線的に増加することが報告されている [17]。つまり、近藤温度はクーロンピークから離れると小さくなり、クーロン振動の谷の部分で最小値をとる。

## (ii) Fano-Kondo 効果

AB リングに量子ドットを埋め込んだ系において、干渉効果である Fano 効果が発現することは 1.2.3 節でみてきたが、量子ドット内のクーロン相互作用が強く、電子のコヒーレンス性が保たれる場合には Fano 効果と近藤効果が共存する (Fano-Kondo 効果)。AB リング系で多体効果を入れた理論計算において、この Fano-Kondo 効果を最初に指摘したのは Hofstetter らであり、彼らは数値繰り込み群法 (NRG 法) を用いて線形応答領域における伝導度を計算した [5]。彼らは、絶対零度かつ線形応答領域において、クーロン相互作用により Fano ピークが共鳴点付近で引き伸ばされプラトーが形成されること、量子ドットを介する経路単独の場合 (アームの効果がない場合) には伝導度はユニタリー極限値に飽和すること、近藤領域では近藤領域の外側に比べて AB 振動の振動周期が半分になること (振動数が二倍)、磁場によるコンダクタンスの変化の様子などを示した。彼らの結果 (文献 [5] の Fig.2) によると、 $T_b = 0$  の場合は ( $T_b$  はバックグラウンドの透過確率) コンダクタンスがユニタリー極限値に達しており、バックグラウンドの透過確率を増すことによって両経路の干渉効果による Fano 効果のため、コンダクタンスがゆがんだ形状をとることがわかる。 $T_b = 1$  の時は、コンダクタンスは反共鳴形状をとっている。また、彼らは AB 振

動についても調べており、近藤領域の外側ではAB振動は $\varphi = 0, \pi$ で最大値をとり、近藤領域内ではバックグラウンドの透過確率に関わらず、 $\varphi = \pi/2$ で最大値をとることを指摘した。更に、振動のフーリエ成分を調べることにより、量子ドットの準位を近藤領域に固定した場合、近藤領域の外側に比べて近藤領域では振動周期が $1/2$ となることを見出した。

実験では、T型結合の量子ドットで反共鳴の場合のFano-Kondo効果、非対称Fano-Kondo効果が観測されており[30, 31, 33]、ABリング系においてもFano-Kondo効果、AB位相の変化が観測され、近藤効果から期待されるプラトー領域での位相ロックなどが確かめられている[32, 33]。先の理論計算で使用された数値繰り込み群の方法は、低温から高温、強相関から弱相関まで幅広く統一的に扱えるため、量子ドット系での近藤効果を扱うのに広く用いられており[37, 38, 39]、クーロンピークの温度変化の関係などを調べるのに非常に有効な手段であるが、非平衡性の強い系を扱うことができない。線形応答領域から外れた領域を議論する際には他の有効な手段を使用する必要がある。

### 1.3 本論文の構成

本章では本研究の課題、背景などについて述べた。以下の構成は次の通りである。第2章は電子間相互作用を考慮しない場合のABリングと量子ドットを組み合わせた複合系における、非平衡定常状態の厳密な構成方法、大域的な特徴について述べる。その後、非平衡Fano効果・AB振動、及び電流ゆらぎなどの結果について考察する。第3章では、finite- $U$  slave-boson mean-field法を用いてクーロン相互作用を取り入れた計算を行ない、Fano-Kondo効果、AB振動などの得られた結果について述べる。更に、それらの現象を非平衡領域に拡張した時の振る舞い、及びFano因子について考察する。第4章は結論にあてる。

## 2 量子複合系における非平衡Fano効果

この章では無限量子系を扱う上で利用されるC\*代数法の考え方を簡単に説明した後、電子間相互作用を考慮しない場合の計算に使用したモデル、非平衡定常状態の構成を述べる。更に非平衡定常電流、電流ゆらぎを導出し、それらの数値計算結果について述べる。

### 2.1 C\*代数法

C\*代数の方法[40, 41, 42, 43, 44]は無限量子系を厳密に取り扱う上で有用な手法である。この方法を用いることによって、量子ドットなどの部分系のみならず電極を含めた系全体の振る舞いを大域的に特徴づけられる。通常、無限系ではハミルトニアンや電子数等の物理量は数学的に意味を持たないが局所物理量の平均値は有限となるので、局所物理量だけが表に現れる方法を採用すべきである。更に、無限系においても局所物理量の運動方程式は有限な量の関係式であり、ハミルトニアンなど定義できないものを扱う必要がない。これがC\*代数の方法の出発点である。

C\*代数の理論について簡単に見ていく。通常量子力学では最初にヒルベルト空間を考え、そのヒルベルト空間上の演算子として物理量を定義する。それとは逆に、C\*代数法では物理量の全体を成す空間を考え、量子力学で波動関数にあたる量子状態は、その空間上の線形汎関数として定義される。物理量の全体を成す空間を $\mathcal{A}$ とおくと、C\*代数の理論では物理量演算子 $A, B$

は以下のような性質を満たす。

- (1)  $A, B \in \mathcal{A} \rightarrow aA + bB \in \mathcal{A} \ (a, b \in \mathbb{C})$
- (2)  $A, B \in \mathcal{A} \rightarrow AB \in \mathcal{A}$
- (3) 反線形の $*$ 演算が定められ、 $(A^*)^* = A$ 、 $\|A^*\| = \|A\|$ 、 $\|A^*A\| = \|A\|^2$ が成立する
- (4)  $\mathcal{A}$  上でノルムが定義され、 $\|A\| < +\infty$  を満たす
- (5)  $\|A^*A\| = \|A\|^2$  (14)

(5) の性質は  $C^*$  性と言われるものである。この空間上の状態は、物理量  $A$  にその観測結果の平均値を対応させる線形汎関数として定義する。これは、物理量の平均値を数え上げて状態を指定することに当たる。 $A \in \mathcal{A}$  に対し  $A$  を観測した結果を  $\omega(A) \in \mathbb{C}$  ( $\mathbb{C}$  は複素数) と書くとする、この写像  $\omega: \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C}$  は以下の性質を満たす。

- (1)  $A, B \in \mathcal{A}$  かつ  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$  の時、 $\omega(\alpha A + \beta B) = \alpha\omega(A) + \beta\omega(B)$
- (2)  $A \geq 0 \rightarrow \omega(A) \geq 0$
- (3)  $1 \in \mathcal{A} \rightarrow \omega(1) = 1$  (15)

$A \geq 0$  は  $A$  がエルミート的で固有値が正であることを示し、正の物理量の平均値は正であるので (2) が要求される。 $1$  は  $\mathcal{A}$  上の単位元であり、その固有値は  $1$  しかいないため、(3) が要求される。具体例として、一次元格子上的自由電子系を考える。この系における  $C^*$  代数は以下の形の要素の積、及びその線形結合から構成される。

$$B(f, g) = \sum_{\sigma=\pm} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \{f_{j,\sigma} c_{j,\sigma} + g_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^*\} \quad (16)$$

$c_{j,\sigma}, c_{j,\sigma}^*$  は一次元格子上的スピン  $\sigma$  の電子の生成消滅演算子で、 $j$  は格子点である。これらの生成消滅演算子は通常の反交換関係を満たす。 $f_{j,\sigma}, g_{j,\sigma}$  は二乗和が有限な数列である。この  $C^*$  代数は CAR 代数と呼ばれている。この代数上での時間発展演算子は以下の極限操作により定義される。

$$\alpha_t(A) \equiv \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} e^{\frac{iH(-\Lambda, \Lambda)t}{\hbar}} A e^{-\frac{iH(-\Lambda, \Lambda)t}{\hbar}} \quad (17)$$

但し  $H$  は以下のようなハミルトニアンである。

$$H(-\Lambda, \Lambda) = -\hbar\gamma \sum_{\sigma=\pm} \sum_{j=-\Lambda}^{\Lambda} \{c_{j,\sigma}^* c_{j+1,\sigma} + c_{j+1,\sigma}^* c_{j,\sigma}\} + \sum_{\sigma=\pm} \sum_{j=0}^L \hbar\epsilon_j c_{j,\sigma}^* c_{j,\sigma} \quad (18)$$

ここで  $\gamma$  は電子のホッピングを表し、 $\epsilon_j$  は局在ポテンシャルを表す。ポテンシャルは有限区間  $[0, L]$  上に局在しているものとする。

$C^*$  代数法は、非平衡定常状態の研究に用いられている。そのひな型となるのは Spohn と Lebowitz による一次元古典調和振動子の非平衡定常状態の構成である。Spohn らは、一次元振動子を二つに分けそれぞれの半無限系が初期状態で異なる温度をもつと仮定し [45]、そこからの時間発展を調べ、 $t \rightarrow +\infty$  で状態が非平衡定常状態に収束することを示した。同様の方法で、上述した一次元格子上的電子系 [46, 47, 48]、接合系 [49] において非平衡定常状態が厳密に構成されることが示されている。

本研究で対象としたメゾスコピック系における量子ドットを埋め込んだ AB リングも電極を無限系と考えることで、上記の先行研究で扱われたモデルと同様に扱うことができるため、非平衡定常状態が厳密に構成されることが期待される。

## 2.2 AB リングに量子ドットを埋め込んだ複合系

本章では量子ドットを埋め込んだ AB リング系の電気伝導を記述する際に使用したモデル (図 5) について説明する。図のように量子ドットを片側の腕に埋め込んだ AB リングを左右の電極に接続する。この時、左電極と右電極はそれぞれ二次元の半無限系とする。Anderson モデルに左電極から右電極へ直接トンネルする電子の状態を表す項を付け加えたハミルトニアンを用い、クーロン相互作用  $U$  を  $U=0$  とした。この場合の全ハミルトニアンは

$$H_0 = H_L + H_R + H_D + H_T + H_{LR} \quad (19)$$

のように記述され、個々のハミルトニアンは以下のように表される。第 1 項は各々の電極の電子状態を表す。

$$H_r = \sum_{\sigma} \int dk \omega_{kr} a_{k\sigma r}^{\dagger} a_{k\sigma r} \quad (20)$$

$\omega_{kr}$  は電子のエネルギー状態を表し ( $r=L, R$ )、外部バイアス電圧の効果は  $\omega_{kL} = \omega_{kR} - eV = \hbar^2 k^2 / (2m) - eV/2$  と記述される。記号  $V$  は外部バイアス電圧を、 $m$  は有効質量を表す。電子の生成 (消滅) 演算子は  $a_{k\sigma r}^{\dagger} (a_{k\sigma r})$  のように記述されそれぞれ  $k$  は波数、 $\sigma$  はスピン状態 ( $\sigma = \pm$ ) を表す。第 3 項の  $H_D$  :

$$H_D = \sum_{\sigma} \tilde{\epsilon}_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} \quad (21)$$

は単一レベルの量子ドット内の電子状態を表し、 $c_{\sigma}^{\dagger} (c_{\sigma})$  は量子ドット内の電子の生成 (消滅) 演算子を、 $\tilde{\epsilon}_{\sigma}$  は量子ドット内の電子のエネルギーを記述する。以降は計算を簡単にするため  $\tilde{\epsilon}_0 \equiv \tilde{\epsilon}_{\sigma} (\sigma = \pm)$  と仮定する。量子ドットと両電極のトンネリングは

$$H_T = \sum_{\sigma} \int dk \{ u_{kL} a_{k\sigma L}^{\dagger} c_{\sigma} + u_{kR} a_{k\sigma R}^{\dagger} c_{\sigma} + (\text{H.c.}) \} \quad (22)$$

と記述され、量子ドットを介さない両電極間の直接結合は

$$H_{LR} = \sum_{\sigma} \iint dk dq \{ W u_{kL} u_{qR} e^{i\varphi} a_{k\sigma L}^{\dagger} a_{q\sigma R} + (\text{H.c.}) \} \quad (23)$$

と表される。簡単化のため、以後の議論では  $u_{kr} (r=L, R)$  を実数かつ波数依存性がないものとして扱う。また、電子の輸送現象はトンネリングの行列要素の形に強く依存しないと考えられるため、第 5 項目の  $H_{LR}$  の電極間のホッピングを表す行列要素は  $W u_{kL} u_{kR}$  の形をとるものと仮定した。つまり、ハミルトニアン  $H_{LR}$  として可分なものをとっても一般性を失わない。上記のモデルでは AB リングの間に磁場を通すことが可能であり、AB 位相  $\varphi$  と磁束  $\Phi$  は以下のような関係をもつ： $\varphi = e\Phi/(\hbar c)$ 、 $c$  は光速である。

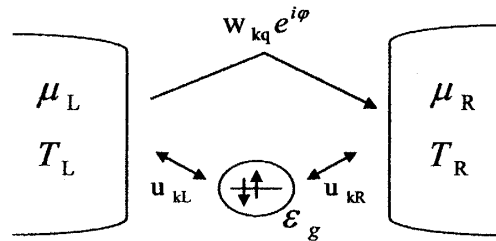


図 5: AB リングに量子ドットを埋め込んだ複合系。

### 2.3 漸近場の演算子と非平衡定常状態の構成法

電子間相互作用を考慮しない場合では、平均場ハミルトニアンに対して系の非平衡定常状態が厳密に構成できる [50, 51, 52]。ここでは非平衡定常状態を特徴付ける漸近場の演算子 (in-field operator) 及び定常状態の構成法について説明する。

漸近場の演算子  $\beta_{k\sigma r}(r=L, R)$  はハイゼンベルグの方程式:  $[H_0, \beta_{k\sigma r}] = -\omega_{kr}\beta_{k\sigma r}$  の解であり、この方程式から導出される (詳しくは付録 C に記載した)。ハミルトニアン  $H_0$  の電子の消滅演算子  $a_{k\sigma r}$  と漸近場の演算子  $\beta_{k\sigma r}$  は  $t \rightarrow -\infty$  で境界条件:  $a_{k\sigma r}(t) \exp(i\omega_{kr}t/\hbar) \rightarrow \beta_{k\sigma r}$  を満たす。全ハミルトニアン  $H_0$  が束縛状態を持たない時、つまり量子ドット内の状態が電極と結合することによって電極の電子状態に取り込まれる時には、漸近場の演算子  $\beta_{k\sigma r}$  はもとの演算子  $a_{k\sigma r, c\sigma}$  を使用して以下のように記述できる。

$$\beta_{k\sigma r} = a_{k\sigma r} + \int dk' \left\{ \frac{u_{kr}u_{k'r}a_{k'\sigma r}}{\omega_{kr} - \omega_{k'r} - i0} \frac{\xi_r(\omega_{kr})}{\Lambda(\omega_{kr})} + \frac{u_{kr}u_{k'r}a_{k'\sigma \bar{r}}}{\omega_{kr} - \omega_{k'r} - i0} \frac{\kappa_r(\omega_{kr})}{\Lambda(\omega_{kr})} \right\} + \frac{\chi_r(\omega_{kr})}{\Lambda(\omega_{kr})} u_{kr}c_{\sigma} \quad (24)$$

補助関数はそれぞれ以下の様に記述される。

$$\begin{aligned} \chi_r(x) &= 1 + W e^{i\varphi_r} M_r(x) \\ \xi_r(x) &= 1 + M_r(x) \{W^2(x - \tilde{\epsilon}_0) + 2W \cos \varphi\} \\ \Lambda(x) &= v(x)(x - \tilde{\epsilon}_0) - \sum_r M_r(x) - 2W \cos \varphi M_L(x) M_R(x) \\ v(x) &= 1 - W^2 M_L(x) M_R(x) \\ \kappa_r(x) &= 1 + W e^{i\varphi_r} (x - \tilde{\epsilon}_0) \end{aligned} \quad (25)$$

ここで  $M_r(x) = \int d\tilde{k} \frac{u_{kr}^2}{x - \omega_{kr} - i0}$  であり、 $\bar{L}=R, \bar{R}=L, \varphi_L=\varphi, \varphi_R=-\varphi$  と略記した。

ここからは量子ドットを含む AB リング系における非平衡定常状態の構成方法、及び特徴について考える (付録 D に補足を記述した)。初期状態では左右の半無限系部分、有限の部分系と 3 部に分け、左右の半無限系を電極、部分系を量子ドットを埋め込んだ AB リング系と考える。それぞれの初期平衡状態を  $C^*$  代数上の  $\mathcal{A}$  上の状態  $\omega_L, \omega_R, \omega_0$  で与えるとなると、初期状態  $\omega$  はテンソル積

$$\omega = \omega_L \otimes \omega_R \otimes \omega_0 \quad (26)$$

で与えられる。この全系の初期状態  $\omega$  は部分系の詳細に関わらず  $t \rightarrow \pm\infty$  でただ一つの quasifree な定常状態  $\omega_{\pm}$  に弱収束する。これは、以下の物理操作に相当する。(1) まず初めに左右電極間のトンネル結合を切っておき、左電極、右電極としてそれぞれ異なる温度 ( $T_L$  及び  $T_R$ ) と異なる化学ポテンシャル ( $\mu_L$  及び  $\mu_R$ ) を持つ平衡状態にしておく。この初期状態の密度行列を  $\rho_0$  とおく。(2)  $t=0$  で電極、量子ドット間のトンネル結合を接続すると  $t \rightarrow +\infty$  で系全体の状態:  $\rho_t \equiv e^{-iH_0 t/\hbar} \rho_0 e^{iH_0 t/\hbar}$  は定常状態  $\rho_+$  に向かって  $\lim_{t \rightarrow +\infty} \text{tr}(A \rho_t) = \text{tr}(A \rho_+)$  の意味で時間発展する (弱収束)。ここで  $A$  は任意の局所的物理量を表す。このようにして得られた非平衡定常状態は Wick の定理を満たし (quasifree な状態)、以下のような二点間相関関数によって特徴付けられる。

$$\langle \beta_{k\sigma r}^\dagger \beta_{k'\sigma' r'} \rangle = F_r(\varepsilon) \delta(k - k') \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{rr'} \quad (27)$$

ここで  $\langle \dots \rangle \equiv \text{tr}(\dots \rho_+)$  は非平衡定常状態での平均を表し、 $F_r(\varepsilon)$  はフェルミ分布関数 (温度  $T_r$ 、化学ポテンシャル  $\mu_r$ ) である。

この非平衡定常状態では量子ドットから遠く離れた領域で熱平衡状態が保たれている。そのことを示すために、一つの指標として左電極における一体相関関数を考える。系の空間上の任意の点を  $x, y$  とすると、定常状態では一体相関関数は左電極に関する波動関数  $\hat{\psi}_L(x) = \sum_{\sigma} \int_{\mathbf{R}^2} dk a_{k\sigma L} e^{ikx}$  を用いて、 $\langle \hat{\psi}_L^{\dagger}(x) \hat{\psi}_L(y) \rangle$  と表すことができる。演算子  $a_{k\sigma L}$  は付録 C で示すように漸近場の演算子を用いて展開することが可能であり、これを上記の相関関数に代入すると、

$$\langle \hat{\psi}_L^{\dagger}(x) \hat{\psi}_L(y) \rangle = \int dk e^{-ik(x-y)} F_L(k) + \iint dk dk' e^{-ikx} e^{ik'y} A(k, k') \quad (28)$$

のように計算できる。 $F_L(k)$  はフェルミディラック分布関数、 $A(k, k')$  は波数  $k$  と  $k'$  の関数である。 $|x|, |y| \rightarrow +\infty$  かつ  $|x-y| < +\infty$  の時、第 2 項はリーマン・ルベークの定理により消去する。よって上記の極限では、

$$\langle \hat{\psi}_L^{\dagger}(x) \hat{\psi}_L(y) \rangle = \int dk e^{-ik(x-y)} F_L(k) \quad (29)$$

となり、平衡状態における一体相関関数と等しくなる。従って、定常状態では量子ドットから遠く離れた領域において熱平衡分布を回復している、つまり十分遠方では熱平衡分布をとる。更に非平衡定常状態では、相対エントロピー生成率が常に正（両電極が平衡状態にある場合は 0 をとる）であることが示されるが、詳細は 2.7 節で述べる。

## 2.4 非平衡電流特性

### ・非平衡定常電流の計算

AB リング系の定常電流は、左電極の電子数演算子： $N_L = \sum_{\sigma} \int dk a_{k\sigma L}^{\dagger} a_{k\sigma L}$  に関するハイゼンベルグ方程式： $J = -e\dot{N}_L = i(e/\hbar)[N_L, H_0]$  より導出できる。 $J$  は左電極から右電極に流れる電流の演算子である。非平衡定常状態での平均をとると、電流は電子の生成消滅演算子を用いて、

$$\langle J \rangle = \frac{e}{\hbar} \int dk u_{kL} J_k^{\text{dot}} + \frac{e}{\hbar} \iint dk dq W u_{kL} u_{qR} J_{kq}^{\text{arm}} \quad (30)$$

のように記述できる。ここで  $J_k^{\text{dot}} = i\langle a_{k\sigma L}^{\dagger} c_{\sigma} \rangle + (\text{c.c.})$  は量子ドットを介した電流を表し、 $J_{kq}^{\text{arm}} = ie^{i\varphi} \langle a_{k\sigma L}^{\dagger} a_{q\sigma R} \rangle + (\text{c.c.})$  は左電極から右電極に直接流れる電流を表す。定常電流を求めるには、もとの生成消滅演算子の非平衡定常状態における平均を求めればよい。漸近場の演算子の定常状態での相関関数は (27) 式により表されているので、もとの電子の演算子を漸近場を用いて展開し、(27) 式を用いて定常電流を導出する。(24) 式を逆に解くと、もとの電子の消滅演算子  $a_{k\sigma r}$ 、 $c_{\sigma}$  は漸近場の演算子  $\beta_{k\sigma r}$  を用いて以下のように表される（詳細は付録 C を参照のこと）。

$$\begin{aligned} a_{k\sigma r} &= \beta_{k\sigma r} + \int dk' \left( \frac{u_{kr} u_{k'r}}{\omega_{k'r} - \omega_{kr} + i0} \frac{\xi_r(\omega_{k'r})^* \beta_{k'\sigma r}}{\Lambda(\omega_{k'r})^*} + \frac{u_{kr} u_{k'\bar{r}}}{\omega_{k'\bar{r}} - \omega_{kr} + i0} \frac{\kappa_r(\omega_{k'\bar{r}})^* \beta_{k'\sigma \bar{r}}}{\Lambda(\omega_{k'\bar{r}})^*} \right) \\ c_{\sigma} &= \sum_{r=L,R} \int dk \frac{u_{kr} \chi_r(\omega_{kr})^* \beta_{k\sigma r}}{\Lambda(\omega_{kr})^*} \end{aligned} \quad (31)$$

それぞれの関数は (25) 式と同じである。(30) 式に (31) 式を代入し、 $t \rightarrow +\infty$  の極限をとり相関関数 (27) 式を利用すると、定常電流はランダウアー公式の形にまとめることができる。

$$\langle J \rangle = -\frac{e}{\hbar} \int_{\mu_c}^{\infty} d\varepsilon T(\varepsilon) \{F_L(\varepsilon) - F_R(\varepsilon)\} \quad (32)$$

積分の下限は  $\mu_c = \max\{\omega_{kL}, \omega_{kR}\}_{k=0}$  で、 $F_r(\varepsilon)$  は各電極の電子状態に関するフェルミ分布関数である。透過確率  $T(\varepsilon)$  は、

$$T(\varepsilon) = \frac{2\Gamma^2}{|\Lambda(\varepsilon)|^2} \{(W(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_0) + \cos \varphi)^2 + \sin^2 \varphi\} \quad (33)$$



と表される。但し、トンネルの行列要素  $u_{kr}$  は  $k$  依存性がない:  $u_{kr} \equiv u_r$  と仮定し、スピン量子数に依らないと仮定した。更にドットと電極の結合の強さを対称な場合:  $2\pi u_L^2 \rho_L = 2\pi u_R^2 \rho_R \equiv \Gamma$  に限った。但し  $\rho_r (r=L, R)$  は電極の状態密度である。微分伝導度 (コンダクタンス) は電流をバイアス電圧で微分したものであり以下のように表される。

$$G = \frac{\partial \langle J \rangle}{\partial V} \quad (34)$$

一般に、絶対零度の時の線形応答領域における微分伝導度は透過確率の式に一致する。

上式の透過確率は Fano の公式に当てはめることが可能であり [5, 53, 54]、Fano の非対称パラメータ  $q$  を導入して、スピン当たりの透過確率の式をまとめると、

$$\begin{aligned} T(\varepsilon) &= T_b \frac{(\tilde{E} + \tilde{q})^2}{\tilde{E}^2 + 1} + \frac{\sin^2 \varphi}{\tilde{E}^2 + 1} \\ &= T_b \frac{|\tilde{E} + q|^2}{1 + \tilde{E}^2} \end{aligned} \quad (35)$$

のように表すことができる。ここで  $\tilde{E} = (1+x)[\varepsilon/\Gamma - \tilde{\varepsilon}_0/\Gamma + \{\sqrt{x}/(1+x)\}\cos\varphi]$ 、 $\tilde{q} = (1-x)\cos\varphi/(2\sqrt{x})$  であり、 $T_b = 4x/(1+x)^2$  はアームの寄与を表すバックグラウンドの透過確率、 $x$  は両電極の状態密度  $\rho_r$  を用いて、 $x = \pi^2 W^2 u_L^2 \rho_L u_R^2 \rho_R$  と表すことができる。 $x$  の強さによってアームによる電子のトンネリングの寄与を調整することができる。量子ドットを介した経路のみの場合は  $x=0.0$  であり、直接トンネルの寄与のみになる場合は  $x=1.0$  である。伝導度の非対称形状を決定する Fano の非対称パラメータは

$$q = \{(1-x)\cos\varphi + i(1+x)\sin\varphi\}/2\sqrt{x} \quad (36)$$

と表される。 $x=0.0$ 、つまり  $q$  の実部が  $\infty$  をとる時、微分伝導度は Breit-Wigner 型の共鳴ピークをもつ。反対に  $x=1.0$ 、つまり  $q$  の実部が  $0$  をとる時、微分伝導度は反共鳴型のディップ構造をもつ。Fano のオリジナルの論文ではこの非対称パラメータは実数として表されているが、時間反転対称性を破る系では複素数とすべきことが提唱されている [6]。AB リングは間に磁場を通すことが可能であり、磁場により時間反転対称性が破られるので非対称パラメータは (36) 式のように複素数値となる。以下、絶対零度の場合の数値計算結果についてみていく。

#### ・非平衡定常電流

線形応答領域での電流の形状は微分伝導度の形状と同様に、共鳴散乱位置を中心として非対称な共鳴ピークを示す (図 4 を参照)。バイアス電圧を大きくかけ、線形応答領域から外れた時の電流の形状がどのように変化していくかを考察する。図 6 に様々な大きさのバイアス電圧を印加した時の電流の形状を示す。線形応答領域 ( $eV \simeq 0$ ) においては、量子ドットの準位が電極のフェルミエネルギー準位を通過する際に共鳴トンネルが生じるため、電流は共鳴準位付近で典型的な非対称形状である Fano ピークを示す。前章で説明したように、非対称な共鳴ピークは量子ドットを介した経路を通過する電子とアームを通る電子が干渉を起こすことによって生じる。バイアス電圧を増加させると、図 6 のように電流の最大値 ( $eV/\varepsilon_F = 0.3$  の時の DOT LEVEL = 1.0 の付近) と最小値 (DOT LEVEL = 0.7 の付近) の間の距離が広がり、共鳴幅が非常に広くなることがわかる。左右の化学ポテンシャルの差がバイアス電圧に比例するので、バイアス電圧が増加すると化学ポテンシャルの差も広がり、電流の最大値と最小値と距離が広げられる。このようにして共鳴ピークの幅も広がる。Zhu らによっても、同様な電流のバイアス電圧依存性が得られている [55]。

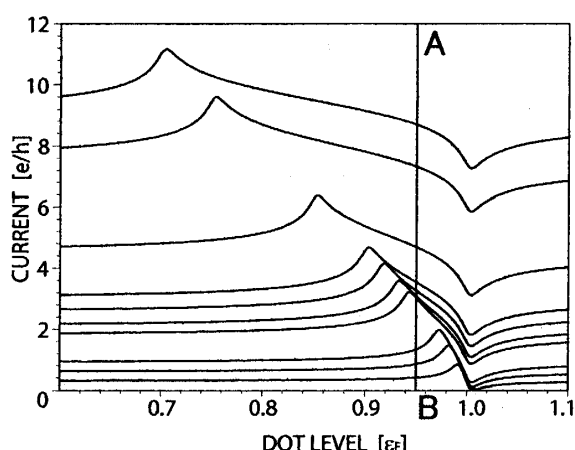


図 6: 絶対零度における非平衡電流。横軸は量子ドットの準位、縦軸は電流を表す。それぞれの曲線はバイアス電圧の違いを表す：下から  $eV/\varepsilon_F = 0.01, 0.02, 0.03, 0.06, 0.07, 0.085, 0.10, 0.15, 0.25, 0.30$ 。  $\varepsilon_F$  は  $eV/\varepsilon_F = 0$  の時のフェルミエネルギーである。  $eV/\varepsilon_F = 0$  の場合の共鳴ピーク位置は DOT LEVEL = 1.0 付近である。その他のパラメタは AB 位相が  $\varphi = 0$ 、 $\Gamma W = 0.6$ 。

#### ・ Aharonov-Bohm 振動

Aharonov-Bohm 効果 (AB 効果) は、リング系の伝導体に磁場を通した際に、コンダクタンスが磁場の関数として振動を示す現象である。この現象を理解するには電子が一部のコヒーレンス性を保って伝導することが重要である。電子がリングを通過した後に再び合流した時、二つの経路の位相差が協力的であるか相殺的であるかによりコンダクタンスが振動する (AB 振動)。AB 効果に関しては付録 B にまとめた。

ここで、実験によって観測されている AB 振動について簡単に記述する。量子ドットを含む AB リング複合系で、量子ドット内の輸送測定により電子のコヒーレンス成分が含まれていることを初めて観測したのは Yacoby らのグループである [1]。彼らはドットの電気伝導のうちで電子は少なくとも一部のコヒーレンスを保って伝導すること以外にも、ゲート電圧の変化に対して AB 振動の位相がクーロン振動のピークをまたぐと  $\pi$  だけシフトし、全てのピークに対し同じ位相シフトを示すことを観測した。共鳴ピークの前後で位相の変化量がちょうど  $\pi$  であることは、フリーデルの総和則 (量子ドット内での電荷量の変化  $\Delta Q$  は電子の位相変化との間に次のような関係式が成立する:  $\Delta Q/e = \Delta\theta/e$ ,  $e$  は電荷素量) により説明することができる。更に電子の位相がクーロン振動のピークの前後で急激に  $\pi$  変化する現象は、オンサガーの相反定理 [56, 57] により伝導度は磁場に対して偶関数となることから説明される [12, 58]。Yacoby らの実験で使用された二端子系の AB リングではオンサガーの定理が成立することが知られており、それにより AB 振動の位相は 0 または  $\pi$  しかとりえない。二端子系ではリングを介して、再び電子が合流する地点での反射が起こりうるため、完全な二重スリットの条件が満たさなくなるために上記のような位相ロックが起こる。電子の位相はクーロン振動の谷でも急激に  $\pi$  だけずれることが実験で観測されており [58]、つまり共鳴ピークを通過すると電子の位相は元に戻ると考えられる。ドットでの位相変化が全てのクーロンピークで等しくなる現象について多くの理論的研究が報告されている [59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66]。

本研究では上記の共鳴ピークと AB 位相の関係を念頭に置き、量子ドットの準位を固定して非平衡状態での電流の AB 位相依存性を調べた。図 7 にドット準位を固定した場合の様々なバイアス電圧に依存した AB 振動の様子を示す。図 7 から読み取れるように、固定したドット準位の位

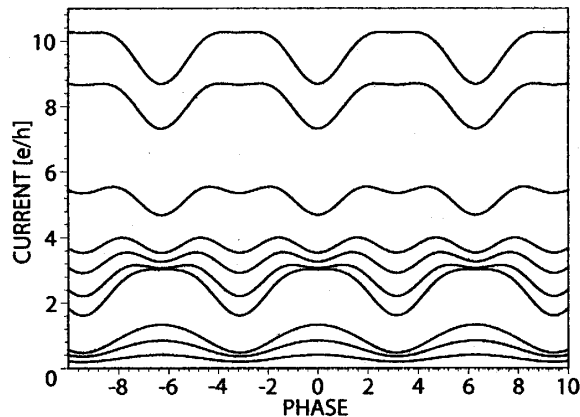


図7: 様々なバイアス電圧下におけるAB振動の様子。横軸はAB位相、縦軸は電流。それぞれの曲線はバイアス電圧の変化を示す、値は図6と同じ。量子ドットの準位は図6のABラインの位置に固定した。他のパラメタは $\Gamma W = 0.6$ 。

置が電流ピークの左側にある時（下から3つの曲線、すなわち低バイアス領域）は典型的なAB振動を示すが、ドット準位が電流ピークの中央に位置する時はそれより二倍の周期をもった振動形状を示す（図7の $|eV| = 0.10 \times \epsilon_F$ の位置を参照）。バイアス電圧を増加させると、電流の最大値が固定したドットの準位を通過するため、ピークをまたいでゲート電圧を固定することになるので位相が $\pi$ だけずれる。高バイアス側では最初の振動形状と $\pi$ だけずれた振動形状を示すのはこのためである。すなわち、AB振動は低バイアス領域では $\varphi = 0$ で最大値をとっていたが、高バイアス領域では $\varphi = 0$ で最小値をとる。バイアス電圧を変化させ、ゲート電圧をピークの各点に固定することにより、共鳴ピークの前で位相が $\pi$ だけずれる現象がみられることがわかった。また磁場（AB位相）に対して電流は偶関数であるので先に述べたオンサガーの定理を満たしている。AB振動の最大値、最小値を図7から読み取ると、量子ドットの準位が共鳴ピークを通過する前は、電流は $\varphi = 0$ で最大値をとっていたが、ピークの中央で周期が半分になる振動現象を示し、その前後で最大値はなめらかに $\varphi = \pm\pi$ に移行する。ところが、最小値はピークの中央で $\varphi = \pi$ から $\varphi = 0$ に急激的に移行する。AB振動の最大値と最小値で位相の変化の仕方が異なることがこの図から示される。線形応答領域における共鳴ピークの各点でドットの準位を固定した場合の、AB振動の同様な振る舞いが理論的に調べられており [59, 64]、Kangらは共鳴ピークのある点で、AB振動が消滅し位相が特異的に変化することを指摘した。これは共鳴ピークのある点においてコヒーレント性が失われるためにそのような変化が得られると考えられている [64]。本研究の数値計算結果ではAB振動に特異な現象は見られず、連続的に変化の様子が得られた。

#### ・ 非線形伝導特性

図6の結果から、電流の形状がバイアス電圧によって大きく変化することが確かめられた。ここでは更に、縦軸に電流、横軸にバイアス電圧をとることにより、非線形伝導特性を調べた結果について述べる。図8に電流のバイアス電圧依存性を示す。バイアス電圧差を変化させることによって、量子ドットの準位が左右どちらかのフェルミエネルギーを通過する際に、図8のような非線形特性を示すことがわかる。つまり共鳴ピークが生じる際に非線形伝導特性が生じていると考えられる。この図から、共鳴点以外ではバイアス電圧に対し電流は一次関数的に増加しているので、バイアス電圧を増加させると電流がその分だけ増加するという一般的な振る舞いが見られる。共鳴ピークが生じる際には電流の増加が停滞されるために、非線形伝導現象が見られることがわかる。それぞれの曲線はAB位相の違いを表しており、AB位相は磁場に比例するので、磁

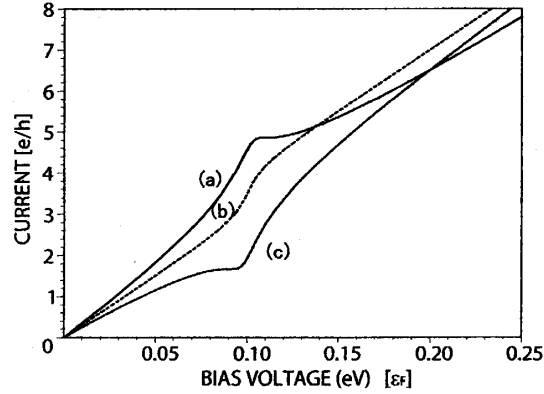


図 8: 非線形伝導特性。横軸はバイアス電圧、縦軸は電流を表す。量子ドットの準位が電極のフェルミエネルギーの位置を通過する際に、電流は非線形伝導特性を示す。電流の形状は磁場によって制御することが可能である (AB 位相 : (a)  $\varphi = 0$ 、(b)  $\varphi = \pi/2$ 、(c)  $\varphi = \pi$ )。他のパラメタは  $\Gamma W = 0.6$ 。

場により非線形伝導特性を変化させることができる。つまり、磁場は電流を切ったり流したりするスイッチのような役割をし、電流を制御することが可能であると考えられる。

## 2.5 非平衡電流ゆらぎ

前述の電流の計算と同様の手法を用いて電流ゆらぎとその Fano 因子を導出する。Fano 因子はショットノイズのポアソン値  $2eJ$  ( $J$  は電流) からのずれを表す量で、量子ドット系における Fano 因子も多数調べられている [62, 67, 68, 69, 70]。ここでは電子間相互作用を考慮しない場合の電流ゆらぎ及び Fano 因子の計算を紹介し、電子間相互作用を考慮した場合の Fano 因子については第 3 章で述べることにする。

電流ゆらぎは一定時間  $\tau$  の間に左電極から右電極に流れる電子数の演算子  $\hat{n}(\tau)$  を用いて表すことができる：

$$\hat{n}(\tau) = \frac{-1}{e} \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \quad (37)$$

$\hat{J}(t)$  は前章で導出した電流の演算子である。振動数  $\omega = 0$  の時の電流相関のパワースペクトル  $S(0)$  は、上式を用いて、

$$S(0) \equiv \lim_{\tau \rightarrow +\infty} \frac{\langle \{\hat{n}(\tau) - \langle \hat{n}(\tau) \rangle\}^2 \rangle}{\tau} \quad (38)$$

と記述できる。ここで  $\tau$  は無限大の極限值をとっているので、パワースペクトルの周波数  $\omega = 0$  の値を見ていることに相当する。 $\langle \dots \rangle$  は非平衡定常状態における ... の期待値を表す。右辺の分母は、(37) 式を用いて、

$$\langle \{\hat{n}(\tau) - \langle \hat{n}(\tau) \rangle\}^2 \rangle = \frac{1}{e^2} \int_0^\tau dt \int_0^\tau ds \{ \langle \hat{J}(t) \hat{J}(s) \rangle - \langle \hat{J}(t) \rangle \langle \hat{J}(s) \rangle \} \quad (39)$$

と表される。非平衡定常状態において Wick の定理が成立することと二点間相関関数 (27) 式を用いると、以下の表式を得る。

$$S(0) = \frac{2e^2}{h} \int_{\mu_L}^{\infty} d\varepsilon \left\{ T(\varepsilon) \sum_r F_r(\varepsilon) [1 - F_r(\varepsilon)] + T(\varepsilon) [1 - T(\varepsilon)] [F_L(\varepsilon) - F_R(\varepsilon)]^2 \right\} \quad (40)$$

上式の第1項は熱雑音の項を示しており、第2項はフェルミ粒子の場合の散弾雑音の項を示している。絶対零度の場合は第1項の熱雑音の項は存在しないので第2項の散弾雑音の項のみが寄与する。よって絶対零度の場合にはゆらぎのパワースペクトル（電流ゆらぎ）は透過確率を用いて

$$S(0) = \frac{2e^2}{h} \int_{\mu_L}^{\mu_R} d\epsilon T(\epsilon)(1 - T(\epsilon)) \quad (41)$$

と求められる。散弾雑音は、非平衡定常電流を運ぶ電荷が有限電荷  $e$  を単位にもつことから生じると考えられており [71]、絶対零度では電子の透過が0、または完全透過の場合に（透過確率  $T(\epsilon)$  が0か1の場合）、散弾雑音は0となる。

#### ・電流と電流ゆらぎの関係

図9に  $\phi = 0$  の時の、低バイアス電圧、高バイアス電圧の時の電流の形状 (a) 及び電流ゆらぎ (b) を示す。低バイアス電圧をかけた場合、電流ゆらぎの形状に注目すると二つのディップが生じており、一つは電流が最小値をとる位置で、もう一つは電流が最大値をとる位置で生じている。電流が最大値をとる点でゆらぎが抑えられる理由は、伝導体中の電子がすべて流れるものとして使用されるため（そのため電流が最大値をとる）、電子がゆらぐ余地が存在しないことを示している。電子が系の中をパウリ原理により空間的にほぼ等間隔に並んで流れるため（電子間距離に相関があるという）、電流ゆらぎは消滅する。これは、電子間相互作用を考慮しない場合の完全導体に生じる現象と同様であり [72]、電子が規則正しく伝導体中を流れることを示している。電流値が最大値をとる時にゆらぎが抑えられる現象は他の理論研究でも調べられている [73]。

電流形状のバイアス依存性は図6で説明したが、ここでは電流ゆらぎとバイアス電圧の関係について考察する。バイアス電圧を大きくすると Fano 共鳴が壊れる過程が見られるが、それに伴い電流ゆらぎにおいても低バイアス時に存在していた二つのディップ構造が不明瞭になる。更にバイアス電圧を高くしていくと、電流ゆらぎは一定値に近づいていく。Fano 共鳴が壊れ明瞭な非対称形状が見られなくなると同時に、電流が最大値をとる点でゆらぎが抑えられる現象も不明瞭となる。これは、高バイアス電圧になるにつれ量子ドットを介する経路の影響が小さくなり、左右電極の直接結合の影響が大きくなるために明瞭な干渉効果が見られなくなったと考えられる。

#### ・電流ゆらぎにおける干渉効果

AB 位相が  $\phi = \pi/2$  の時は、量子ドットを通過する経路にアームを加えた場合においても電流の形状は Breit-Wigner 型の共鳴散乱形状に一致する。すなわち、 $\phi = \pi/2$  の時は Fano 効果が起きているにも関わらず、アームがない場合の量子ドット単体の系における伝導度の形状と一致する。図10に量子ドット単一系の場合と量子ドットを埋め込んだ AB リング複合系の場合の電流 (a)、及び電流ゆらぎ (b) を示す。電流の形状 (a) は両者とも左右対称の共鳴ピークを示しているが、ゆらぎに大きな変化が生じていることがわかる。アームを取り付けた複合系の場合の電流ゆらぎは、量子ドットを介する経路のみの場合のゆらぎ（右図 (b)）とアームの電流ゆらぎ（一定値）の単なる二つの経路の足し合わせになっておらず、それよりもゆらぎが抑えられる傾向がある。これは両経路の干渉効果が電流ゆらぎを抑える方向に働いているためと考えられる。今、系全体の電子数ゆらぎの演算子を  $\delta\hat{n}$  とし、量子ドットを介する経路からの寄与を  $\delta\hat{n}_{dot}$ 、アームからの寄与を  $\delta\hat{n}_{arm}$  とすると、

$$\delta\hat{n} = \delta\hat{n}_{dot} + \delta\hat{n}_{arm} \quad (42)$$

と表され、非平衡定常状態では

$$\langle \delta\hat{n}^2 \rangle = \langle \delta\hat{n}_{dot}^2 \rangle + \langle \delta\hat{n}_{arm}^2 \rangle + \langle \delta\hat{n}_{dot} \delta\hat{n}_{arm} + \delta\hat{n}_{arm} \delta\hat{n}_{dot} \rangle \quad (43)$$

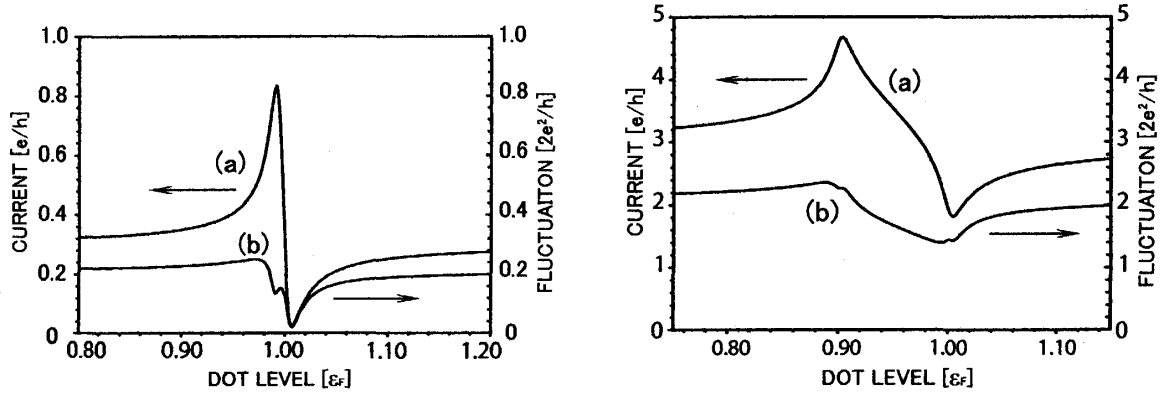


図 9: 左図: 低バイアス電圧の場合 ( $eV/\varepsilon_F = 0.01$ ) の電流 (a) と電流ゆらぎ (b)。右図: 高バイアス電圧の場合 ( $eV/\varepsilon_F = 0.1$ ) の電流 (a) と電流ゆらぎ (b)。両者とも他のパラメタは等しく、 $\Gamma W = 0.6$  かつ  $\varphi = 0$ 。低バイアス電圧では電流値が最大値をとる位置でゆらぎが抑えられる現象が見られる。バイアス電圧を次第に大きくしていくと、電流ゆらぎに見られていたディップが消滅する。

となる。上式の第3項目は両経路の干渉によるものと考えられ、これが電流ゆらぎを抑える方向に働くために上記の現象が見られたと考えられる。 $\varphi = \pi/2$  の場合、電流の形状では干渉効果は明瞭に現れなかったが、ノイズのパワースペクトルを見ることによってゆらぎには両経路の干渉効果が現れていることが示された。

#### ・電子間相互作用を考慮しない場合の Fano 因子

Fano 因子はショットノイズのポアソン値からのずれを表す量で、以下のように定義される。

$$\gamma \equiv \frac{S(0)}{2eJ} \quad (44)$$

ここで  $S(0)$  は振動数  $\omega = 0$  の時の電流ゆらぎのパワースペクトル、 $J$  は平均電流である。これは noise figure と呼ばれることもある [72]。 $\gamma = 1$  の時は、古典的ショットノイズと一致し、個々の電子間にまったく相関がない (つまりランダムな挙動を示す)。今の場合、Fano 因子は以下のよう導出することができる。

$$\gamma = \int_{\mu_c}^{\infty} d\varepsilon \left\{ T(\varepsilon) \sum_r F_r(\varepsilon) [1 - F_r(\varepsilon)] + T(\varepsilon) [1 - T(\varepsilon)] [F_L(\varepsilon) - F_R(\varepsilon)]^2 \right\} / 2eJ \quad (45)$$

図 11 に低バイアス電圧及び高バイアス電圧の場合における Fano 因子のドット依存性を示す。それぞれの曲線は AB 位相の違いを表している。絶対零度かつ、低バイアス電圧の時、Fano 因子は  $\gamma = 1 - T$  と評価される。この式から、電流値が最大 ( $T = 1$ ) の場合は  $\gamma = 0$  となり、反対に、電流値が最小 ( $T = 0$ ) の場合は  $\gamma = 1$  となることがわかる。前者ではショットノイズはポアソン値  $2eJ$  から大きくずれるので、電子はほぼ等間隔に系を通過することになる。そのため、量子ドットを介する経路と電極同士の直接経路を通過する電子は互いに協力的な干渉を示す。図 11 では Fano 因子が 1 に近いほどゆらぎの振る舞いはポアソンのことを示している。この時、電子はランダムな挙動を示すために互いに相関がなく、両経路は相殺的に干渉する。高バイアス電圧においては、電流の形状も Fano ピークから大きくずれるため、Fano 因子は低バイアスの時とは

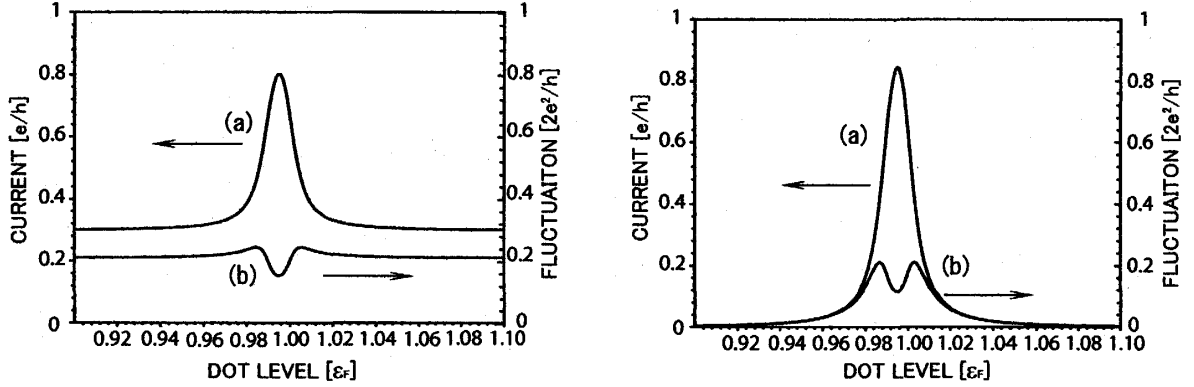


図 10: 左図：複合系  $\varphi = \pi/2$  の時の電流 (a) と電流ゆらぎ (b)。右図：量子ドットを介する経路のみのときの電流 (a) と電流ゆらぎ (b)。他のパラメタは  $eV/\epsilon_F = 0.01$ 、 $\Gamma W = 0.6$ 。電流の形状は両者とも対称形の共鳴ピークを表すが、電流ゆらぎには両経路の干渉効果が現れる。

異なる挙動を示す。実際、高バイアス電圧の場合は、量子ドットを介する経路より電極同士の直接経路の寄与が大きくなるため、低バイアス電圧の時のようなショットノイズの振る舞いは見られなくなる。

## 2.6 非平衡久保公式

線形応答領域における電気伝導度は有名な久保公式によって計算できる [74]。この節では、久保公式が非平衡状態でどのように書き換えられるかを調べる。久保公式によると、平衡での相関関数のフーリエ・ラプラス変換と非平衡系の量であるコンダクタンスに次のような関係がある。

$$G = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{Q_{eq}^{(o)}(\omega)}{i\omega} \quad (46)$$

ここで  $Q_{eq}^{(o)}(\omega) = \text{Im} Q_{eq}(\omega)$  で、 $Q_{eq}(\omega)$  は平衡での電流の相関関数の平均をフーリエ・ラプラス変換したものである。

$$Q_{eq}(\omega) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{-i\omega t} \langle [\hat{f}(t), \hat{f}] \rangle_{eq} \quad (47)$$

久保の線形応答理論では右辺の相関関数は平衡での平均をとっているが、以下では非平衡状態での平均をとった場合、どのように変わるかを検討する。一次元格子模型では、非平衡定常状態において久保公式に補正項が表れることが示されている [47]。

非平衡定常状態での電流の相関のフーリエラプラス変換、

$$Q(\omega) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{-i\omega t} \langle [\hat{f}(t), \hat{f}] \rangle \quad (48)$$

を計算する。この場合の  $\langle \dots \rangle$  は、今までの計算と同様、... の非平衡定常状態での平均を意味する。電流の演算子は (30) 式で求められているので、もとの演算子を漸近場の演算子で展開し、二点関数 (27) 式を使用すると (48) 式の虚部は振動数  $\omega \rightarrow 0$  の極限で、

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{Q^{(o)}(\omega)}{i\omega} = \int d\epsilon \left[ \frac{e^2}{2\hbar} T(\epsilon) \left\{ \frac{\partial F_L(\epsilon)}{\partial \epsilon} + \frac{\partial F_R(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right\} + \Theta(\epsilon) \{F_R(\epsilon) - F_L(\epsilon)\} \right]$$

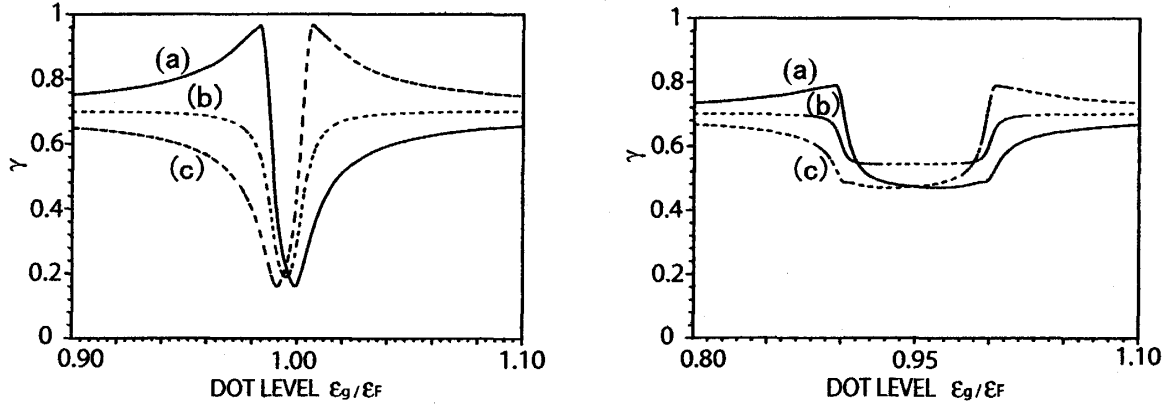


図 11: 左図：低バイアス電圧の場合 ( $eV/\epsilon_F = 0.01$ ) Fano 因子。右図：高バイアス電圧の場合 ( $eV/\epsilon_F = 0.1$ ) の Fano 因子。それぞれの曲線の違いは磁場による AB 位相の違いを表す: (a)  $\phi = \pi$ 、(b)  $\phi = \pi/2$ 、(c)  $\phi = 0$ 。他のパラメタは両者とも、 $\Gamma W = 0.6$ 。Fano 因子が 1 に近いほどショットノイズはポアソンのである。

と求められる。 $F_r(\epsilon)$  ( $r = L, R$ ) は各々の電極に関するフェルミディラック分布関数であり、 $\Theta(\epsilon)$  はバイアス電圧  $V$  に依存しない以下のようなエネルギー  $\epsilon$  の関数である。

$$\Theta(\epsilon) = \left\{ \left( \frac{\partial}{\partial \epsilon} - \frac{\partial}{\partial \epsilon'} \right) U_L(\epsilon) U_R(\epsilon') |f_2^*(\epsilon) g_1(\epsilon') - g_2^*(\epsilon) f_1(\epsilon')|^2 \right\}_{\epsilon=\epsilon'} \quad (49)$$

それぞれの補助関数は、

$$\begin{aligned} f_1(\epsilon) &= \frac{u_{kL}}{\Lambda(\epsilon)} (\epsilon - \tilde{\epsilon}_0 - M_R(\epsilon))^* \\ f_2(\epsilon) &= \frac{u_{kR}}{\Lambda(\epsilon)} M_L(\epsilon)^* (1 + W e^{i\phi} (\epsilon - \tilde{\epsilon}_0)) \\ g_1(\epsilon) &= \frac{u_{kL}}{\Lambda(\epsilon)} (1 + M_R(\epsilon) (W^2 (\epsilon - \tilde{\epsilon}_0) + 2W \cos \phi)) \\ g_2(\epsilon) &= \frac{u_{kR}}{\Lambda(\epsilon)} (1 + W e^{i\phi} (\epsilon - \tilde{\epsilon}_0)) \end{aligned} \quad (50)$$

と表される。但し、

$$\begin{aligned} \Lambda(x) &= v(x)(x - \tilde{\epsilon}_0) - \sum_{r=L,R} M_r(x) - 2W \cos \phi M_L(x) M_R(x) \\ v(x) &= 1 - W^2 M_L(x) M_R(x) \\ M_r(x) &= \int d\tilde{k} \frac{u_{kr}^2}{x - \omega_{kr} - i0} \\ U_r(x) &= \int d\tilde{k} u_{kr}^2 \delta(x - \omega_{kr}) \end{aligned}$$

関数  $\Theta(\epsilon)$  については、左右電極に  $eV/2$  ずつバイアス電圧をかける状況を考えると（この状況では量子ドットの準位、 $\tilde{\epsilon}_0$  はバイアス電圧に依存しない）以下の形にまとめることができる。

$$\begin{aligned} \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{Q^{(o)}(\omega)}{i\omega} &= \frac{\partial \langle \hat{J} \rangle}{\partial V} + \frac{e}{2} \frac{\partial \langle \hat{J} \rangle}{\partial \tilde{\epsilon}_0} \\ &= G + \frac{e}{2} \frac{\partial \langle \hat{J} \rangle}{\partial \tilde{\epsilon}_0} \end{aligned} \quad (51)$$



$G = \frac{\partial \langle J \rangle}{\partial V}$  は微分コンダクタンスである。(51) 式によると、非平衡定常状態では久保公式から第2項分だけずれることがわかる。我々は上式を非平衡状態に拡張した久保公式と呼ぶことにする。第2項は電流を量子ドットの準位で微分した項であり、量子ドット準位を上下させることによる電流の変化量を表している。

## 2.7 相対エントロピーと熱力学第二法則

本節で、2.3節で触れた相対エントロピー生成量の正值性、及び熱力学の第2法則との関係述べる。相対エントロピーは無限量子系に拡張され、重要な物理量と考えられている[75, 76, 77, 78]。孤立系では、密度行列  $\rho$  で表されるギブスのエントロピー  $S_G(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho)$  は一定なので(時間微分が0をとる)不可逆性を議論する際に用いるのは適切ではない。Zubarev は非平衡定常状態でのエントロピーを  $S_Z = -\text{Tr}(\rho \log \rho_I)$  の形をとるものとして導入した[79]。ここで  $\rho_I$  は局所平衡状態である。我々の使用しているモデルは電極に半無限系のものを用いているので、時間  $t$  の密度行列  $\rho(t)$  に対する局所平衡状態  $\rho_I$  を  $\rho(0)$  として選んでもよい。よって時間  $t$  における Zubarev のエントロピーは  $S_Z(t) = -\text{Tr}(\rho(t) \log \rho(0))$  と書ける。電極を無限系として扱っているため、 $S_Z$  自身は無限値をとるので Zubarev のエントロピーそのものは意味がない。そこでギブスのエントロピーとの差をとると、

$$\begin{aligned} S(\rho(t)|\rho_0) &= k_B \{S_Z(t) - S_G(\rho(t))\} \\ &= k_B \text{Tr} \{ \rho(t) (\log \rho(t) - \log \rho_0) \} \end{aligned} \quad (52)$$

と表され、有限の値に書き換えることができる。ここで  $k_B$  はボルツマン定数である。時間  $t$  での密度行列  $\rho(t)$  及び時間0での密度行列  $\rho_0$  は

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \frac{1}{z} \exp \left\{ -\frac{H_L(t) - \mu_L N_L(t)}{k_B T_L} - \frac{H_R(t) - \mu_R N_R(t)}{k_B T_R} \right\} \\ \rho_0 &= \frac{1}{z} \exp \left\{ -\frac{H_L - \mu_L N_L}{k_B T_L} - \frac{H_R - \mu_R N_R}{k_B T_R} \right\} \end{aligned} \quad (53)$$

のように記述できる。ここで  $z$  は分配関数、 $H_r(r=L, R)$  は電極の電子状態に関するハミルトニアン、 $N_r(r=L, R)$  は電極の電子数、 $\mu_r(r=L, R)$  は化学ポテンシャルである。これを(52)式に代入し、(27)式及び(31)式を利用すると、相対エントロピーを導出することができる。ここでは更に、熱力学の法則との関係を考察するためにエントロピー生成量を計算する。エントロピー生成量： $\sigma(t) \equiv \frac{d}{dt} S(\rho(t)|\rho_0)$  は非平衡定常状態で、以下のように計算できる。

$$\sigma = \lim_{t \rightarrow +\infty} \sigma(t) = - \int d\varepsilon T(\varepsilon) \left( \frac{\varepsilon - \mu_L}{T_L} - \frac{\varepsilon - \mu_R}{T_R} \right) \{F_L(\varepsilon) - F_R(\varepsilon)\} \quad (54)$$

$F_r(\varepsilon)(r=L, R)$  はフェルミディラック分布関数である。上式より、エントロピー生成量は温度  $T_r(r=L, R)$  が有限の値をとると仮定して、

$$\sigma \sim \int d\varepsilon T(\varepsilon) \left( \frac{\varepsilon - \mu_L}{T_L} - \frac{\varepsilon - \mu_R}{T_R} \right)^2 \quad (55)$$

と近似できる。 $T(\varepsilon) \geq 0$  であるので、定常状態で相対エントロピー生成量  $\sigma$  は常に正值をとることが示される。等号が成立する時は、 $T_L = T_R$  かつ  $\mu_L = \mu_R$  を満たす時、つまり二つの電極が互いに平衡状態にある時に限る。エントロピー生成量が常に正であるということは、熱力学の第2法則に矛盾しない。

## 2.8 第2章のまとめ

本章では、AB リングに量子ドットを埋め込んだ系について、電子間相互作用を考慮しない場合を論じた。得られた結果は、以下の通りである。

- ①漸近場の演算子を導出し、C\* 代数法を用い、全ハミルトニアンに関する非平衡定常状態を厳密に構成した。C\* 代数の方法を用いると量子ドット単体だけではなく電極の効果も考慮に入れることができるので、系全体の非平衡定常状態を大域的に特徴付けることが可能である。その状態において、量子ドットから十分離れた領域では系の平衡性が回復されること、系全体の相対エントロピーは常に正値をとることを示した。
- ②非平衡定常電流を導出し、バイアス電圧により Fano ピークがゆがんでいく過程を考察した。
- ③ AB 振動の変化から、位相が共鳴ピークをまたいで  $\pi$  だけシフトすることを確認した。更に、非平衡性が強い領域での AB 振動の振る舞いを求め、AB 振動の最大値と最小値で位相シフトの様子が異なることを指摘した。
- ④電流のバイアス依存性について調べ、非線形伝導特性が磁場によって制御可能なことを示した。
- ⑤線形応答領域では、電流が最大値をとる点で電流ゆらぎは抑えられることを示し、バイアス電圧を大きくしていくにつれ、ゆらぎに明瞭なディップが見られなくなることを示した。
- ⑥ AB 位相  $\varphi = \pi/2$  の時の電流の形状は、Fano 効果が起きているにも関わらず量子ドットを介する経路単独の時の電流の形状に一致する。しかし、 $\varphi = \pi/2$  の時の電流ゆらぎは単なる二つの経路の足し合わせになっておらず、両者の干渉効果が現れることを示した。
- ⑦ Fano 因子を導出し、線形応答領域での古典的ショットノイズとの関係を調べた。更に高バイアス領域では電極同士の直接結合の寄与が大きくなるため、古典的ショットノイズに一致しなくなることを示した。
- ⑧非平衡定常状態における電流の相関関数の平均値を計算し、非平衡定常状態では線形応答領域において成立する久保公式に補正項が現れることを示し、非平衡久保公式を導出した。

以上の考察から C\* 代数法がメゾスコピック系の輸送現象を扱う上で有用であることが示唆される。

## 3 量子複合系における非平衡 Fano-Kondo 効果

前章までは、量子ドット内部の電子間相互作用を考慮しない場合について述べた。本章では、更にクーロン相互作用を取り入れた、より現実に近いモデルについて検討する。量子ドットでは系が非常に微小なために、クーロン相互作用の効果が顕著に現れる。そこで前章まで議論をしていた Fano 効果を念頭に置き、量子ドットを埋め込んだ AB リング系において電子間相互作用を考慮した場合を考えていく。具体的なモデル計算に入る前に、強相関系の計算に多く用いられている slave-boson 法についてみていく。

### 3.1 Slave-Boson 法

近藤効果などの強相関系の計算に用いられる一つの手法として、slave-boson 法がある。この方法は、量子ドット系の近藤効果を扱うのに有用であり、様々な理論研究で用いられている。ドット内クーロン相互作用を無限大にとる infinite- $U$  slave-boson 法とクーロン相互作用を有限に扱う finite- $U$  slave-boson 法の二つが存在するが、ここでは特に後者の方法について述べる。finite- $U$  slave-boson 法は最初に Kotliar らによって導入された [80]。まず拘束条件によって制限されたボ

ソン演算子を導入し、更に平均場近似を使用することによって強相関係のハミルトニアンを電子間相互作用を考慮しない場合と同等のハミルトニアンに書き換える。この方法では、ドット内での二重占有確率を表す演算子を有限に扱うことができ (infinite- $U$  slave-boson 法では 0 となる)、更にクーロン相互作用が有限値  $U$  をもつため反強磁的な交換相互作用を表すパラメタ  $J = 4t^2/U$  を定義することができる。この方法を使用して、単独の量子ドットを直接電極と結合させた系においてコンダクタンスがユニタリー極限値に飽和すること、ゼロバイアスでコンダクタンスに極大値が現れること [81]、近藤効果と磁場との関係 [82]、近藤効果とショットノイズの関係 [70]、ダブルドット系における非平衡近藤効果 [83]、ドット間結合と近藤効果の関係 [84, 85]、AB リングに量子ドットを埋め込んだ系でのスピンフリップを考慮した近藤効果 [86] など多くの興味深い研究が報告されている。finite- $U$  slave-boson 法と平均場法を使用した方法は、絶対零度かつ低バイアス電圧の非平衡状態における近藤効果を説明するのに有用であると考えられている。他方、非平衡状態での近藤効果と干渉効果である Fano 効果の両者を考慮した理論的研究は (Fano 効果と近藤効果の interplay など) まだあまり行われていない。そこで我々は Kotliar らの方法を使用して、非平衡状態にまで拡張した計算を行った [87]。

### 3.2 クーロン相互作用を取り入れた量子複合系

モデルとして、第 2 章の計算で用いたハミルトニアンに量子ドット内のクーロン相互作用を表す項を加えたハミルトニアン  $\tilde{H}$  を用いた。これは、金属中に不純物原子を含む系を記述する際に用いられるアンダーソンハミルトニアンに [88]、左電極、右電極間の直接結合の項を付け足したもので以下のように表される。

$$\tilde{H} = H_0 + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} \quad (56)$$

ここで  $U$  はクーロン相互作用であり、 $n_{\sigma}$  ( $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ) は量子ドット内の電子数である。 $H_0$  は電子間相互作用を考慮しない場合の計算に用いたハミルトニアンであり、(19) 式で与えられる。

量子ドット内の電子間相互作用を考慮した強相関係の輸送現象を扱うのにあたって、前節で説明した Kotliar-Ruckenstein の finite- $U$  slave-boson mean-field 法を用いる。彼らは、電子の二重占有確率を記述するために、4 つの補助ボゾン場:  $\hat{e}$ ,  $\hat{p}_{\sigma}$  ( $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ) 及び  $\hat{d}$  を導入した。それぞれ、電子が空の状態、電子が一つずつ占有されている状態、電子が二つ占有されている状態を表す。更に、フェルミ統計を考慮するため量子ドット内の状態を表すフェルミオン場  $f_{\sigma}$  を導入する。これらのボゾン場、フェルミオン場を導入することで、もともと演算子の組  $\{a_{k\sigma L}, a_{k\sigma R}, c_{\sigma}\}$  で記述されていた系は  $\{a_{k\sigma L}, a_{k\sigma R}, f_{\sigma}, \hat{e}, \hat{p}_{\sigma}, \hat{d}\}$  で記述される系に拡張される。任意の状態ベクトルを  $|\Phi\rangle$  とすると、それぞれの電子状態は以下のように対応付けることができる。

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle &\leftrightarrow \hat{e}^{\dagger} |\Phi\rangle \\ c_{\sigma}^{\dagger} |\Phi\rangle &\leftrightarrow f_{\sigma}^{\dagger} \hat{p}_{\sigma}^{\dagger} |\Phi\rangle \\ c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow}^{\dagger} |\Phi\rangle &\leftrightarrow \hat{d}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow}^{\dagger} |\Phi\rangle \end{aligned}$$

(19) 式中の電子の生成消滅演算子は、導入したボゾン演算子とフェルミ演算子を用いて、

$$\begin{aligned} c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} &\rightarrow f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \\ n_{\uparrow} n_{\downarrow} &\rightarrow \hat{d}^{\dagger} \hat{d} \\ c_{\sigma} &\rightarrow \hat{z}_{\sigma} f_{\sigma} \end{aligned}$$

と書き換えられる。ここで  $\hat{z}_\sigma$  はボゾン演算子から作られる演算子で、Kotliar らは

$$\hat{z}_\sigma = (1 - \hat{d}^\dagger \hat{d} - \hat{p}_\sigma^\dagger \hat{p}_\sigma)^{-1/2} (\hat{e}^\dagger \hat{p}_\sigma + \hat{p}_\sigma^\dagger \hat{d}) (1 - \hat{e}^\dagger \hat{e} - \hat{p}_\sigma^\dagger \hat{p}_\sigma)^{-1/2} \quad (57)$$

と定義した [80]。但し、 $\sigma = \uparrow$  の時は  $\bar{\sigma} = \downarrow$  を、 $\sigma = \downarrow$  の時は  $\bar{\sigma} = \uparrow$  を表す。この演算子は量子ドットと電極間の結合に関係し、平均場近似の下で多体相互作用を表す重要なパラメータとなる。クーロン相互作用の項  $U n_\uparrow n_\downarrow$  は  $U \hat{d}^\dagger \hat{d}$  と書き換えられる。ボゾン場を導入し、系の自由度を拡張したためにあらわれる実現可能でない物理状態を拘束条件を用いて排除する。すなわち、拡張した系の状態ベクトルのうち、以下の拘束条件を満足するもの  $|\Phi_{ph}\rangle$  のみが物理的に意味をもつ。

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_{1\sigma} |\Phi_{ph}\rangle &\equiv (\hat{p}_\sigma^\dagger \hat{p}_\sigma + \hat{d}^\dagger \hat{d} - f_\sigma^\dagger f_\sigma) |\Phi_{ph}\rangle = 0 \\ \hat{\phi}_2 |\Phi_{ph}\rangle &\equiv \left( \hat{e}^\dagger \hat{e} + \hat{d}^\dagger \hat{d} + \sum_\sigma \hat{p}_\sigma^\dagger \hat{p}_\sigma - 1 \right) |\Phi_{ph}\rangle = 0 \end{aligned} \quad (58)$$

この拘束条件を課すことによって、もとの  $\{a_{k\sigma L}, a_{k\sigma R}, c_\sigma : |\Phi\rangle\}$  で記述されるヒルベルト空間とボゾン場を導入して拡張した  $\{a_{k\sigma L}, a_{k\sigma R}, f_\sigma, \hat{e}, \hat{p}_\sigma, \hat{d} : |\Phi_{ph}\rangle\}$  で記述されるヒルベルト空間は同一視できる。ここで、全ハミルトニアン (56) 式を補助演算子で書き表すと以下ようになる。

$$H = H_{elec} + \sum_\sigma \left\{ \varepsilon_\sigma f_\sigma^\dagger f_\sigma + \int dk [u_{kL} \hat{z}_\sigma^\dagger f_\sigma^\dagger a_{k\sigma L} + u_{kR} \hat{z}_\sigma^\dagger f_\sigma^\dagger a_{k\sigma R} + (H.C.)] \right\} + U \hat{d}^\dagger \hat{d} \quad (59)$$

$H_{elec}$  は左右電極間のトンネリングを表す項  $H_{LR}$  を含めた電極に関するハミルトニアンである。全ハミルトニアンと拘束条件を表す演算子  $\hat{\phi}_{1\sigma}$ 、 $\hat{\phi}_2$  との反交換関係を計算すると、

$$\begin{aligned} \left[ H, \hat{e}^\dagger \hat{e} + \sum_\sigma \hat{p}_\sigma^\dagger \hat{p}_\sigma + \hat{d}^\dagger \hat{d} - 1 \right] &= 0 \\ [H, \hat{p}_\sigma^\dagger \hat{p}_\sigma + \hat{d}^\dagger \hat{d} - f_\sigma^\dagger f_\sigma] &= 0 \end{aligned} \quad (60)$$

となる。ハミルトニアン  $H$  と  $\hat{\phi}_{1\sigma}$  及び  $\hat{\phi}_2$  は交換するのでこれらは互いに独立であり、 $H$  による時間発展と補助条件は両立する。拘束条件は  $q$  数の Lagrange の未定定数を用いてハミルトニアン組み込むことができる。Dirac の議論 [89, 90, 91] によると、 $\hat{\phi}_{1\sigma} |\Phi_{ph}\rangle = 0$  及び  $\hat{\phi}_2 |\Phi_{ph}\rangle = 0$  は未定定数  $\hat{\lambda}_\sigma^{(1)}$ 、 $\hat{\lambda}^{(2)}$  を用いて effective なハミルトニアン

$$\bar{H} \equiv H + \sum_\sigma \hat{\lambda}_\sigma^{(1)} \hat{\phi}_{1\sigma} + \hat{\lambda}^{(2)} \hat{\phi}_2 \quad (61)$$

に書き換えることができる。 $H$  は (59) 式の電子間相互作用を含めた全ハミルトニアンである。この時、任意の物理量の演算子  $A$  についてハイゼンベルグ方程式を

$$\frac{dA}{dt} |\Phi_{ph}\rangle = \frac{i}{\hbar} [\bar{H}, A] |\Phi_{ph}\rangle \quad (62)$$

と課することができる。実際、(61) 式の付加項は  $\hat{\phi}_{1\sigma} |\Phi_{ph}\rangle = 0$ 、 $\hat{\phi}_2 |\Phi_{ph}\rangle = 0$  を用いて落とすことができる。Lagrange の未定定数を用いて拘束条件を組み込んだ effective ハミルトニアン  $\bar{H}$  を書き下すと、以下ようになる。

$$\begin{aligned} \bar{H} &= H_L + H_R + H_{LR} + \sum_\sigma \int dk \{ \hat{z}_\sigma^\dagger (u_{kL} f_\sigma^\dagger a_{k\sigma L} + u_{kR} f_\sigma^\dagger a_{k\sigma R}) + (H.C.) \} + U \hat{d}^\dagger \hat{d} \\ &+ \sum_\sigma \varepsilon_\sigma f_\sigma^\dagger f_\sigma + \sum_\sigma \hat{\lambda}_\sigma^{(1)} (\hat{p}_\sigma^\dagger \hat{p}_\sigma + \hat{d}^\dagger \hat{d} - f_\sigma^\dagger f_\sigma) + \hat{\lambda}^{(2)} (\hat{e}^\dagger \hat{e} + \hat{d}^\dagger \hat{d} + \sum_\sigma \hat{p}_\sigma^\dagger \hat{p}_\sigma - 1) \end{aligned} \quad (63)$$

### 3.3 非平衡平均場法と非平衡定常状態

#### 非平衡平均場法

Kotliar-Ruckenstein にならいうすべてのボゾン演算子と Lagrange の未定定数を、非平衡定常状態での平均値  $e$ 、 $p_\sigma$ 、 $d$ 、 $\lambda_\sigma^{(1)}$  及び  $\lambda^{(2)}$  で置き換え、平均場近似を非平衡定常状態まで拡張する。拘束条件 (58) 式はこれらの平均値を用いて

$$|e|^2 + |d|^2 + \sum_{\sigma} |p_{\sigma}|^2 = 1 \quad (64)$$

$$\langle f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \rangle = |d|^2 + |p_{\sigma}|^2 \quad (65)$$

のように書き換えられる。 $\langle f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \rangle$  は非平衡定常状態における  $f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}$  の平均である。更にハミルトニアンは以下のように表される。

$$H_{eff} = H_F + U|d|^2 + \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma}^{(1)} (|p_{\sigma}|^2 + |d|^2) + \lambda^{(2)} \left( |e|^2 + |d|^2 + \sum_{\sigma} |p_{\sigma}|^2 - 1 \right) \quad (66)$$

ここで  $H_F$  はフェルミオンに関するハミルトニアンであり、

$$H_F = H_L + H_R + H_{LR} + \sum_{\sigma} \int dk \{ z_{\sigma}^* (u_{kL} f_{\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma L} + u_{kR} f_{\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma R}) + (H.C.) \} + \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \quad (67)$$

と表される。但し  $\bar{\epsilon}_{\sigma} = \epsilon_{\sigma} - \lambda_{\sigma}^{(1)}$  は量子ドットの effective なエネルギー準位であり、もとのドットの準位に比べると Lagrange の未定定数だけ異なる。

導入したボゾン演算子  $e$ 、 $p_{\sigma}$ 、 $d$  と Lagrange の未定定数  $\lambda_{\sigma}^{(1)}$  及び  $\lambda^{(2)}$  を決定するための拘束条件は3つしか与えられていないので、これらの未知数を決定するためには更に4つの条件が必要となる。Kotliar らのオリジナルの方法では、平衡状態の自由エネルギーを用い、鞍点近似法を使用して導出されていたが、今は非平衡定常状態における平均を考えているのでこの方法をそのまま適用することはできない。よって、ボゾン場の運動方程式から未知数を決定するための方程式を導出する。(63) 式のハミルトニアンに対する各々のボゾン演算子のハイゼンベルグの方程式は、以下のように記述される。

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{d} &= - \sum_{\sigma} \int dk \{ [\hat{z}_{\sigma}^{\dagger}, \hat{d}] \tilde{M}_{\sigma} + [\hat{z}_{\sigma}, \hat{d}] \tilde{M}_{\sigma}^{\dagger} \} + \left( U + \sum_{\sigma} \hat{\lambda}_{\sigma}^{(1)} + \hat{\lambda}^{(2)} \right) \hat{d} \\ i\hbar \frac{d}{dt} \hat{e} &= - \sum_{\sigma} \int dk \{ [\hat{z}_{\sigma}^{\dagger}, \hat{e}] \tilde{M}_{\sigma} + [\hat{z}_{\sigma}, \hat{e}] \tilde{M}_{\sigma}^{\dagger} \} + \hat{\lambda}^{(2)} \hat{e} \\ i\hbar \frac{d}{dt} \hat{p}_{\tau} &= - \sum_{\sigma} \int dk \{ [\hat{z}_{\sigma}^{\dagger}, \hat{p}_{\tau}] \tilde{M}_{\sigma} + [\hat{z}_{\sigma}, \hat{p}_{\tau}] \tilde{M}_{\sigma}^{\dagger} \} + \left( \hat{\lambda}^{(2)} + \hat{\lambda}_{\tau}^{(1)} \right) \hat{p}_{\tau} \end{aligned} \quad (68)$$

但し、

$$\tilde{M}_{\sigma} \equiv \int dk (u_{kL} f_{\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma L} + u_{kR} f_{\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma R}) \quad (69)$$

と定義した。この方程式のボゾン演算子及び Lagrange の未定定数を非平衡定常状態の平均値で置き換えると、上式の運動方程式は以下のように書き下せる。

$$\begin{aligned}
 \sum_{\sigma} \left( \frac{\partial z_{\sigma}^*}{\partial d^*} M_{\sigma} + \frac{\partial z_{\sigma}}{\partial d^*} M_{\sigma}^* \right) + \left( U + \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma}^{(1)} + \lambda^{(2)} \right) d &= i\hbar \frac{d}{dt} d = 0 \\
 \sum_{\sigma} \left( \frac{\partial z_{\sigma}^*}{\partial e^*} M_{\sigma} + \frac{\partial z_{\sigma}}{\partial e^*} M_{\sigma}^* \right) + \lambda^{(2)} e &= 0 \\
 \sum_{\sigma} \left( \frac{\partial z_{\sigma}^*}{\partial p_{\tau}^*} M_{\sigma} + \frac{\partial z_{\sigma}}{\partial p_{\tau}^*} M_{\sigma}^* \right) + \left( \lambda_{\tau}^{(1)} + \lambda^{(2)} \right) p_{\tau} &= 0
 \end{aligned} \tag{70}$$

ここで、 $M_{\sigma}$  は非平衡定常状態での平均をとったものであり、

$$M_{\sigma} = \int dk \langle u_{kL} f_{\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma L} + u_{kR} f_{\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma R} \rangle \tag{71}$$

である。交換関係  $[\hat{z}_{\sigma}, \hat{d}]$  の平均値は、

$$\begin{aligned}
 [\hat{z}_{\sigma}, \hat{d}] &= [(1 - \hat{d}^{\dagger} \hat{d} - \hat{p}_{\sigma}^{\dagger} \hat{p}_{\sigma})^{-1/2}, \hat{d}] (\hat{e}^{\dagger} \hat{p}_{\sigma} + \hat{p}_{\sigma}^{\dagger} \hat{d}) (1 - \hat{e}^{\dagger} \hat{e} - \hat{p}_{\sigma}^{\dagger} \hat{p}_{\sigma})^{-1/2} \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} [(d^{\dagger} \hat{d} + \hat{p}_{\sigma}^{\dagger} \hat{p}_{\sigma})^n, \hat{d}] (\hat{e}^{\dagger} \hat{p}_{\sigma} + \hat{p}_{\sigma}^{\dagger} \hat{d}) (1 - \hat{e}^{\dagger} \hat{e} - \hat{p}_{\sigma}^{\dagger} \hat{p}_{\sigma})^{-1/2} \\
 &= - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} \sum_{l=0}^{n-1} (d^{\dagger} \hat{d} + \hat{p}_{\sigma}^{\dagger} \hat{p}_{\sigma})^{n-1-l} \hat{d} (\hat{d}^{\dagger} \hat{d} + \hat{p}_{\sigma}^{\dagger} \hat{p}_{\sigma})^l (\hat{e}^{\dagger} \hat{p}_{\sigma} + \hat{p}_{\sigma}^{\dagger} \hat{d}) (1 - \hat{e}^{\dagger} \hat{e} - \hat{p}_{\sigma}^{\dagger} \hat{p}_{\sigma})^{-1/2} \\
 &\rightarrow - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} n (|d|^2 + |p_{\sigma}|^2)^{n-1} d (e^* p_{\sigma} + p_{\sigma}^* d) (1 - |e|^2 - |p_{\sigma}|^2)^{-1/2} = - \frac{\partial z_{\sigma}}{\partial d^*}
 \end{aligned}$$

のように計算できるので、(70)式では  $[\hat{z}_{\sigma}^{\dagger}, \hat{d}]$  をすべて  $-\frac{\partial z_{\sigma}^*}{\partial d^*}$  と書き換えた。各々のボゾン演算子を  $e = \sqrt{E} e^{i\varphi_1}$ 、 $p_{\sigma} = \sqrt{P_{\sigma}} e^{i\varphi_{\sigma}}$  及び  $d = \sqrt{D} e^{i\varphi_2}$  とおくと (70) 式の実部及び虚部を以下のように書き下すことができる。

$$\begin{aligned}
 \sum_{\sigma} \left( \frac{\partial z_{\sigma}^*}{\partial D} M_{\sigma} + \frac{\partial z_{\sigma}}{\partial D} M_{\sigma}^* \right) + U + \lambda^{(2)} + \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma}^{(1)} &= 0 \\
 \sum_{\sigma} \left( \frac{\partial z_{\sigma}^*}{\partial \varphi_2} M_{\sigma} + \frac{\partial z_{\sigma}}{\partial \varphi_2} M_{\sigma}^* \right) &= 0 \\
 \sum_{\sigma} \left( \frac{\partial z_{\sigma}^*}{\partial E} M_{\sigma} + \frac{\partial z_{\sigma}}{\partial E} M_{\sigma}^* \right) + \lambda^{(2)} &= 0 \\
 \sum_{\sigma} \left( \frac{\partial z_{\sigma}^*}{\partial \varphi_1} M_{\sigma} + \frac{\partial z_{\sigma}}{\partial \varphi_1} M_{\sigma}^* \right) &= 0 \\
 \sum_{\sigma} \left( \frac{\partial z_{\sigma}^*}{\partial \pi_{\tau}} M_{\sigma} + \frac{\partial z_{\sigma}}{\partial \pi_{\tau}} M_{\sigma}^* \right) + \lambda^{(2)} + \lambda_{\tau}^{(1)} &= 0 \\
 \sum_{\sigma} \left( \frac{\partial z_{\sigma}^*}{\partial \varphi_{\tau}} M_{\sigma} + \frac{\partial z_{\sigma}}{\partial \varphi_{\tau}} M_{\sigma}^* \right) &= 0
 \end{aligned} \tag{72}$$

上式より  $z_{\sigma}$  を実数とすると  $M_{\sigma}$  も実数ととることができ、自己無撞着方程式が以下のように導出される。

$$z_\sigma = \frac{\sqrt{EP_\sigma} + \sqrt{DP_\sigma}}{\sqrt{(1-D-P_\sigma)(1-E-P_\sigma)}} \quad (73)$$

$$\lambda_\sigma^{(1)} = 2 \sum_\tau \left( \frac{\partial z_\tau}{\partial E} - \frac{\partial z_\tau}{\partial P_\sigma} \right) M_\tau \quad (74)$$

$$2 \sum_\sigma \frac{dz_\sigma}{dD} M_\sigma + U = 0 \quad (75)$$

但し、非平衡定常状態の平均値で記述される束縛条件  $P_\sigma = \langle f_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle - D$  と  $E = D + 1 - \sum_\sigma \langle f_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle$  を用い、全微分と偏微分の関係  $\frac{d}{dD} = \frac{\partial}{\partial D} + \frac{\partial}{\partial E} - \sum_\tau \frac{\partial}{\partial P_\tau}$  を使用した。以上の議論では平均場近似を使用しているため、ゆらぎの効果を無視してしまっているため電荷のゆらぎが主因となる mixed-valance 状態を記述することはできない [26]。しかし、絶対零度かつ低バイアス電圧のもとでは平均場近似の範囲でも、非平衡領域の近藤効果を記述するのに有用であることが指摘されている [81]。ここでは後者の立場に立って議論を進める。

### 非平衡定常状態

非平衡定常状態を特徴付ける漸近場の演算子をハミルトニアン  $H_F$  に関して構成する。第2章における計算と同様に、ハイゼンベルグの方程式:  $[H_F, \bar{\beta}_{k\sigma r}] = -\omega_{kr} \bar{\beta}_{k\sigma r}$  から漸近場の演算子  $\bar{\beta}_{k\sigma r}$  を計算すると、以下ようになる。

$$\bar{\beta}_{k\sigma r} = a_{k\sigma r} + \frac{\chi_{\sigma r}(\omega_{kr})}{\Lambda_\sigma(\omega_{kr})} z_\sigma u_{kr} f_\sigma + \int dk' \left\{ \frac{(z_\sigma^2 u_{kr} u_{k'r}) a_{k'\sigma r} \eta_{\sigma r}(\omega_{kr})}{\omega_{kr} - \omega_{k'r} - i0} \frac{\eta_{\sigma r}(\omega_{kr})}{\Lambda_\sigma(\omega_{kr})} + \frac{(z_\sigma^2 u_{kr} u_{k'\bar{r}}) a_{k'\sigma \bar{r}} \kappa_{\sigma r}(\omega_{kr})}{\omega_{kr} - \omega_{k'\bar{r}} - i0} \frac{\kappa_{\sigma r}(\omega_{kr})}{\Lambda_\sigma(\omega_{kr})} \right\} \quad (76)$$

但し、

$$\begin{aligned} \chi_{\sigma r}(x) &= 1 + W e^{i\varphi_r} \Omega_{\sigma r}(x) / z_\sigma^2 \\ \kappa_{\sigma r}(x) &= 1 + W e^{i\varphi_r} (x - \bar{\epsilon}_\sigma) / z_\sigma^2 \\ \eta_{\sigma r}(x) &= 1 + \Omega_{\sigma r}(x) \{ W^2 (x - \bar{\epsilon}_\sigma) / z_\sigma^4 + 2W \cos \varphi / z_\sigma^2 \} \\ v_\sigma(x) &= 1 - W^2 \Omega_{\sigma L}(x) \Omega_{\sigma R}(x) / z_\sigma^4 \\ \Lambda_\sigma(x) &= v_\sigma(x) (x - \bar{\epsilon}_\sigma) - \sum_r \Omega_{\sigma r}(x) - 2W \cos \varphi \Omega_{\sigma L}(x) \Omega_{\sigma R}(x) / z_\sigma^2 \\ \Omega_{\sigma r}(x) &= \int d\tilde{k} \frac{z_\sigma^2 u_{kr}^2}{x - \omega_{kr} - i0} \end{aligned}$$

上式では  $\bar{L} = R$ ,  $\bar{R} = L$  及び  $\varphi_L = \varphi$ ,  $\varphi_R = -\varphi$  と記した。電子間相互作用を考慮しない場合と異なる点は、電極と量子ドットの結合定数に  $z_\sigma$  が繰り込まれ、この項が電子のトンネリングを抑制する働きをすることである。第2章における議論と同様に、非平衡定常状態では、

$$\langle \bar{\beta}_{k\sigma r}^\dagger \bar{\beta}_{k'\sigma' r'} \rangle = F_r(\epsilon) \delta(k - k') \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{rr'} \quad (77)$$

が成立し、漸近場の演算子  $\bar{\beta}_{k\sigma r}$  は Wick の定理を満たす。但し  $F_r(\epsilon)$  ( $r = L, R$ ) は左右電極のフェルミディラック分布関数である。

### 3.4 Fano-Kondo 効果

#### 3.4.1 非平衡定常電流

以後の議論では電子間相互作用を考慮しない場合の議論と同様に、トンネルの行列要素を波数依存性を落とし定数である:  $u_{kr} \equiv u_r$  と仮定し、量子ドットと左右電極の結合の強さは左右対称である:  $2\pi u_L^2 \rho_L = 2\pi u_R^2 \rho_R \equiv \Gamma$  と仮定した。ここで  $\rho_r (r=L, R)$  は左右電極の状態密度である。更に磁場によるゼーマンエネルギーを無視し、それぞれのパラメータがスピン縮退しているものと仮定する。つまり、 $\bar{\epsilon}_\uparrow = \bar{\epsilon}_\downarrow \equiv \bar{\epsilon}_0$ ,  $\epsilon_\uparrow = \epsilon_\downarrow \equiv \epsilon_0$ ,  $z_\uparrow = z_\downarrow \equiv z$ ,  $\lambda_\uparrow^{(1)} = \lambda_\downarrow^{(1)} \equiv \lambda$  及び  $\langle f_\uparrow^\dagger f_\uparrow \rangle \equiv \langle f_\downarrow^\dagger f_\downarrow \rangle \equiv n$  と仮定した。よって、自己無撞着方程式 (73) 式、(74) 式、及び (75) 式は以下のように記述できる。

$$z = \frac{\sqrt{(n-D)(1+D-2n)} + \sqrt{D(n-D)}}{\sqrt{n(1-n)}} \quad (78)$$

$$\lambda = \frac{M}{\sqrt{n(1-n)}} \left\{ 2\sqrt{\frac{n-D}{1+D-2n}} - \sqrt{\frac{1+D-2n}{n-D}} - \sqrt{\frac{D}{n-D}} + \frac{z(1-2n)}{\sqrt{n(1-n)}} \right\} \quad (79)$$

$$4\frac{dz}{dD}M + U = 0 \quad (80)$$

電子数  $n$  及び  $M$  は以下のように表される。

$$n = \frac{\Gamma z^2}{2\pi} (1 + z^4 x) \int d\epsilon \frac{1}{|\Lambda(\epsilon)|^2} (F_L(\epsilon) + F_R(\epsilon)) + \frac{\Gamma z^4}{\pi} \sqrt{x} \sin \varphi \int d\epsilon \frac{1}{|\Lambda(\epsilon)|^2} (F_L(\epsilon) - F_R(\epsilon)) \quad (81)$$

$$M = \frac{\Gamma z}{2\pi} (1 + z^2 x) \int d\epsilon \frac{(\epsilon - \bar{\epsilon}_0)}{|\Lambda(\epsilon)|^2} (F_L(\epsilon) + F_R(\epsilon)) + \frac{\Gamma z^2}{\pi} \sqrt{x} \sin \varphi \int d\epsilon \frac{(\epsilon - \bar{\epsilon}_0)}{|\Lambda(\epsilon)|^2} (F_L(\epsilon) - F_R(\epsilon)) \quad (82)$$

ここで  $|\Lambda(\epsilon)|^2/\Gamma^2 = \{(1+x)(\epsilon/\Gamma - (\epsilon_0 - \lambda)/\Gamma) + \sqrt{x} z^2 \cos \varphi\}^2 + z^4$ ,  $x = (\pi W u_L u_R)^2 \rho_L \rho_R$  である。未知数  $D$  と  $\lambda$  は上式の自己無撞着方程式から定められる。

非平衡定常電流は (77) 式を用いて計算できる。左電極の電子数演算子  $N_L = \sum_{\sigma} \int dk a_{k\sigma L}^\dagger a_{k\sigma L}$  の時間発展を表す、 $\bar{H}$  に関するハイゼンベルグ方程式を使用すると定常電流は、

$$\langle J \rangle = -\frac{2e}{h} \int_{\mu_c}^{\infty} d\epsilon T(\epsilon) \{F_L(\epsilon) - F_R(\epsilon)\} \quad (83)$$

と導出される。ここで透過確率  $T(\epsilon)$  は

$$T(\epsilon) = \frac{z^4 \Gamma^2}{|\Lambda(\epsilon)|^2} \left[ \left\{ \frac{2\sqrt{x}}{z^2} \left( \frac{\epsilon}{\Gamma} - \frac{\epsilon_0 - \lambda}{\Gamma} \right) + \cos \varphi \right\}^2 + \sin^2 \varphi \right] \quad (84)$$

でありそれぞれ、第2章の場合と同様に透過確率の式を Fano 公式の形にまとめると、以下になる。

$$T(\epsilon) = T_b \frac{|\tilde{E} + q|^2}{\tilde{E}^2 + 1} \quad (85)$$

ここで  $\tilde{E} = (1+x)[(\epsilon - (\epsilon_0 - \lambda))/(z^2 \Gamma) + \{\sqrt{x}/(1+x)\} \cos \varphi]$  であり、 $T_b = 4x/(1+x)^2$  はバックグラウンドの透過確率である。Fano の非対称パラメータは  $q = \{(1-x) \cos \varphi + i(1+x) \sin \varphi\}/2\sqrt{x}$  と導出される。第2章で論じた電子間相互作用を考慮しない場合と比べると、 $\Gamma$  が  $z^2 \Gamma$  と繰り込まれている点と  $\epsilon_0$  に Lagrange の未定定数が含まれる点が異なる。この両者がクーロン相互作用の影響である。非対称パラメータは第2章と同一である。



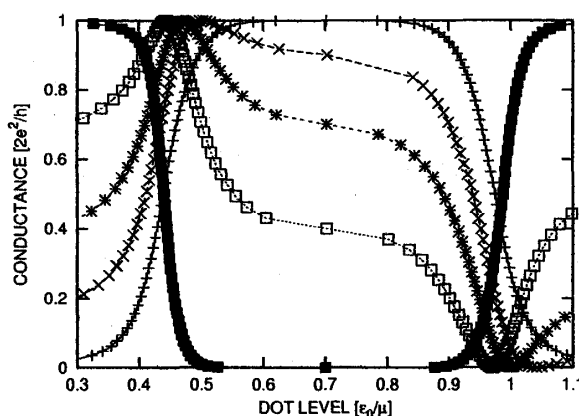


図 12: 絶対零度、線形応答領域での Fano-Kondo 共鳴形状。横軸に量子ドットの準位、縦軸にコンダクタンスをとった。AB 位相は  $\varphi = 0$ 、クーロン相互作用は  $U/\mu = 0.6$  ( $U/\Gamma = 30$ ) と固定した。それぞれの曲線はバックグラウンドの透過確率  $T_b$  の違いを表し、+:  $T_b = 0.0$ 、×:  $T_b = 0.1$ 、\*:  $T_b = 0.3$ 、□:  $T_b = 0.6$  及び ■:  $T_b = 1.0$  を表す。

### 3.4.2 線形応答領域の Fano-Kondo 効果

本節では、絶対零度の場合の線形応答領域でのコンダクタンス:  $G = \frac{\partial \langle J \rangle}{\partial V} |_{V=0}$  を考察する。図 12 に量子ドットの準位に対してコンダクタンスをプロットしたものを示す。AB 位相を  $\varphi = 0$ 、クーロン相互作用  $U/\Gamma = 30$  と設定した。 $T_b$  はバックグラウンドの透過確率であり、電極同士の直接結合によるトンネリングの寄与 (AB リングのアームの寄与) を表したものである。量子ドットのみを介する経路単独の場合 ( $T_b = 0$ ) では、コンダクタンスはユニタリー極限值 ( $G = 2e^2/h$ ) に達しており、明瞭なプラトーが形成される。バックグラウンドの透過確率が増加すると (つまり直接結合の効果が現れると)、両経路による干渉効果である Fano 効果が発現するため、プラトーがゆがめられていく ( $T_b = 0.1, 0.3$ )。  $T_b = 0.6$  の時には通常の Fano 共鳴が共鳴散乱点で引き伸ばされた形状になり、明瞭な Fano-Kondo プラトーが生じる (Fano-Kondo 効果)。もとの共鳴散乱の位置は  $\varepsilon_0/\mu = 1.0$  ( $\mu$  は電極のフェルミエネルギー) であり、近藤効果の発現によってコンダクタンスのピーク位置が  $\varepsilon_0/\mu = 0.4$  にシフトしている。クーロン相互作用の大きさは  $\mu$  を単位として測ると  $U/\mu = 0.6$  であり、コンダクタンスのピーク位置は  $\varepsilon_0/\mu = 1.0 - 0.6 = 0.4$  までシフトする。つまり、クーロン相互作用に相当する分だけコンダクタンスの低電圧ピークは共鳴散乱点から離れる。アームの寄与が大きくなる場合 ( $T_b = 1.0$ ) には、反共鳴の近藤効果が生じておりコンダクタンスにディップ形状が現れる。

図 13 に本研究で用いた slave-boson 法で得られた Fano-Kondo 効果と、Hofstetter らが NRG 法を使用して得た結果 [5]、Meden らが functional renormalization group (FRG) 法を使用して得た結果 [92] を比較したグラフを示す。近藤領域では slave-boson 法で得られた結果と NRG/FRG 法を用いた場合の計算結果は非常によく一致していることがわかる。近藤領域から外れたところでは (特に量子ドットの準位が低い領域) 若干のずれが生じているのが見られるが、これは本研究では平均場法を使用しており、電荷のゆらぎが考慮されていないために生じると予測される。このような比較検討により slave-boson 法を用いた本研究における数値計算結果は NRG 法を用いて Hofstetter らが得た結果 [5] を非常によく再現していることがわかる。従って、少なくとも定性的には量子ドットが埋め込まれた AB リングの振る舞いをよく記述していると考えられる。

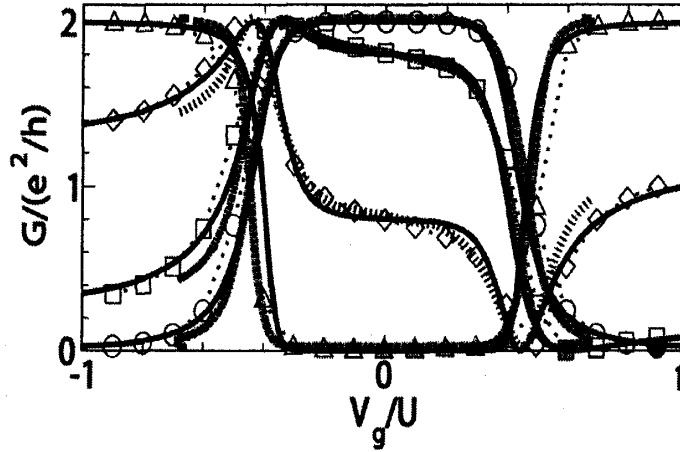


図 13: 本研究で slave-boson 方法を用いて導出した Fano-Kondo 形状 (波線) と Hofstetter らが NRG 法を用いて導出したもの (シンボル) [5]、Meden らが FRG 法を用いて導出したもの (実線) [92] の比較。バックグラウンドの透過確率が  $T_b = 0.0, 0.1, 0.6, 1.0$  の場合に示した。slave-boson 法を使用した場合、ドットの準位が低い方で NRG/FRG 法の場合と若干のずれが見られる。

### 3.4.3 電子間相互作用によるコンダクタンスの変化

図 14 は  $T_b = 0.6$  の場合のクーロン相互作用を次第に大きくした時のコンダクタンスの変化を示したものである。 $U/\Gamma = 1.0$  の時はコンダクタンスにはプラトーが形成されず、電子間相互作用を考慮しない場合に見られた Fano 共鳴に似た形状を示す。 $U/\Gamma = 7.0, 15.0$  の時はコンダクタンスの共鳴点での傾きは少し小さくなるが、明瞭なプラトーは形成されない。更にクーロン相互作用を大きくすると、 $U/\Gamma = 30.0$  では Fano-Kondo プラトーが形成され NRG 法で得られた結果 [5] を非常によく再現する。NRG 法で用いられたクーロン相互作用のパラメータの大きさは、量子ドットと電極の結合の強さ  $\Gamma$  (但し  $\Gamma$  は左右一方の結合の強さ、 $\Gamma = \Gamma_L = \Gamma_R$ ) を用いて  $U/\Gamma \approx 16.0$  と表される。上述したように本研究では  $U/\Gamma = 15.0$  で明瞭なプラトーは形成されておらず、その二倍近い大きさのクーロン相互作用を用いないと NRG 法と同様なプラトーは形成されない。因みに finite- $U$  slave-boson 法を用いた他の研究でも、コンダクタンスにプラトーが得られる領域では本研究で設定したものと同程度のクーロン相互作用を用いている [85]。更に、Meden らにより、FRG 法を使用した場合も Hofstetter らの NRG 法による結果を再現するためには Hofstetter らが用いたクーロン相互作用の大きさの二倍大きいものを用いる必要があることが指摘されている [92]。 $T_b = 0.6$  の場合の非対称形状のピークとディップの距離が  $\Delta\epsilon_0 \doteq 0.6\mu \doteq U$  であることから明瞭なプラトーを得るためにはクーロン相互作用を  $U/\Gamma = 30$  ( $U/\mu = 0.6$ ) と取る必要があると考えられる。

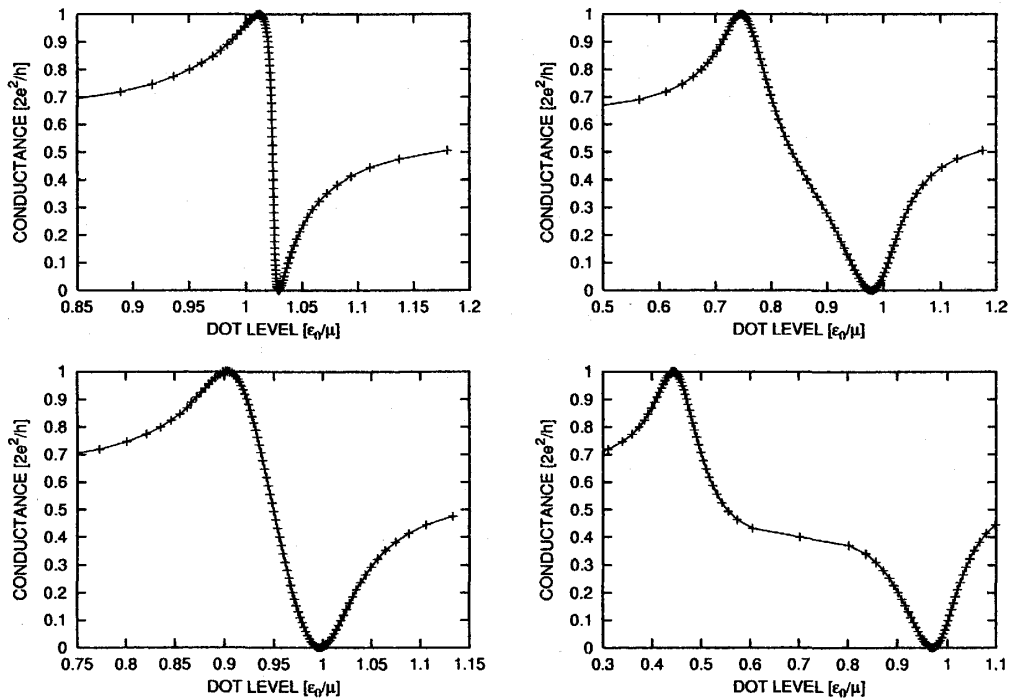


図 14: クーロン相互作用による Fano-Kondo 効果の変化。AB 位相  $\phi = 0.0$ 、バックグラウンドの透過確率  $T_b = 0.6$  と設定した。クーロン相互作用の増加に伴い Fano-Kondo プラトーが形成される様子が見られる。左列上から  $U/\mu = 1.0, 7.0$ 、右列上から  $U/\mu = 15.0, 30.0$ 。  $U/\mu = 1.0$  では電子間相互作用を考慮しない場合と同様な非対称形状の Fano ピークを示す。クーロン相互作用の効果はまだ共鳴ピークの形状にあらわれていない。  $U/\Gamma = 7.0, 15.0$  で、Fano ピークが少し傾く様子が見られ、  $U/\Gamma = 30.0$  で明瞭なプラトー領域が見える。NRG 法で得られた計算では [5]、  $U/\Gamma \approx 16.0$  で明瞭なプラトーが形成されている。

### 3.4.4 補助演算子と Fano-Kondo 効果の関係

この節では Fano-Kondo プラトーの形成過程と finite- $U$  slave-boson 法で使用したボゾン演算子などのパラメータの関係を考察する。図 15 の左列上から  $T_b = 0.6$  の場合のコンダクタンス、多体相関を表すパラメータ  $z$ 、右列上から量子ドット内のスピン当たりの電子数  $n$  と二重占有の確率を表すパラメータ  $d$ 、Lagrange の未定定数  $\lambda$  を示す。量子ドットの準位が電極のフェルミエネルギー ( $\mu_L = \mu_R = \mu$ ) に比べて高い位置にある場合 (図 16 の左図)、ドットへ電子が流れることはできないため、ドット内の電子数は 0 となる。この状況は電子数  $n$  のグラフで  $\epsilon_0/\mu \gtrsim 1.0$  において  $n = 0$  となることに示されている。この領域におけるコンダクタンスは電子間相互作用がない場合と同様なディップを示す。量子ドットの準位を下げていき (図 16 の真中の図) 量子ドットの準位と左右電極のフェルミエネルギーが一致すると、アップまたはダウンの電子一つだけ量子ドットに入ることができる。これはドット内の電子数が  $n = 1/2$  となっていることからわかる。  $0.5 \lesssim \epsilon_0/\mu \lesssim 0.9$  の領域では、スピン当たりの電子数は  $n = 1/2$  に固定されており、二重占有確率を表すパラメータ  $d$  は依然として 0 のままである。これはクーロン相互作用により二つ目の電子が量子ドット内に付け加わろうとすると、エネルギーが  $U$  だけ上昇してしまうので、ドットの準位を二つの電子が占められないためであると考えられる (図 16 の真中の図)。この結果、コンダクタンスに明瞭なプラトーが形成される。量子ドットの準位がクーロン相互作用分  $U/\mu$  だけフェ

ルミエネルギーから下げられると（図 16 の最右図）、 $\varepsilon_0/\mu \lesssim 0.4$  の範囲において電子数  $n$  が 1 に近づき二重占有確率  $d$  が急激に上昇する。 $d=1$  は量子ドット内で二重占有が確実に起こっていることを意味する。これは量子ドットの準位がフェルミエネルギーから  $U$  だけ下がったことにより、二番目の電子が電極から量子ドット内に流れたことを意味する。この状態では量子ドットをアップスピン、ダウンスピンの二つの電子が占有し（量子ドット内の二重占有）、二番目の電子が流れることによりコンダクタンスにピーク（非対称形状のピークに相当）が現れる（ $\varepsilon_0/\mu = 0.4$  付近）。以上が量子ドット内の電子数と二重占有確率の変化から見た Fano-Kondo プラトーの形成過程である。

コンダクタンスにプラトーが形成される過程は多体効果を表すパラメータ  $z$  や Lagrange の未定定数  $\lambda$  と密接な関係がある。図 15 の下側の図はそれぞれ  $z$  及び Lagrange の未定定数  $\lambda$  を示している。 $z$  は量子ドットと電極の結合定数  $u_{kr}(r=L,R)$  の係数であり、量子ドットと電極間のトンネリングの強さを表している。 $z=1$  では  $u_{kr}z = u_{kr}$  となるので、電子間相互作用が働いていない場合の結合定数と同様である。 $z$  の振る舞いを見ると、コンダクタンスがプラトーを持つ領域で最小値をとっている。量子ドットの準位を下げていくにつれ、 $z$  が小さくなるということは、電子のトンネリングがクーロン相互作用によって抑制されていることを示している。更にフェルミエネルギーからクーロン相互作用分だけ量子ドットの準位を下げると  $z=1$  に回復していくが、これはクーロン相互作用によって禁止されていた電子のトンネリングが再び起こり始めたことを示している。この振る舞いは、先ほど考察した量子ドット内の電子数  $n$  と二重占有の確率  $d$  の振る舞いに矛盾していない。最後に Lagrange の未定定数  $\lambda$  の振る舞いを考察する。Lagrange の未定定数は effective な量子ドットの準位に組み込まれていたことを思い出すと、 $\varepsilon_0 = \bar{\varepsilon}_0 + \lambda$  であり、つまり  $\lambda$  は effective な量子ドットの準位ともとの準位の差を表している。クーロン相互作用が効いていない領域（ $\varepsilon_0/\mu > 1.0$ ）では  $\lambda$  の変化がほとんどないため、もとの量子ドットの準位と effective な準位とは同等である。しかし、クーロン相互作用の効果が顕著になる領域（ $0.45 \lesssim \varepsilon_0/\mu \lesssim 1$ ）では  $\lambda$  は大きく変化をしているため（図 15 では大きく減少している）もとの準位と effective な準位との間に大きな差が生じる。準位の差が広がることにより、クーロン相互作用がきいてくる領域でコンダクタンスが引き伸ばされるためにプラトー領域が形成される。以上見てきたように、ボゾン演算子の振る舞いは電子がドットに一つずつ伝導する過程やクーロン相互作用の効果などの物理現象を非常によく説明することができる。このように Fano-Kondo プラトーの形成過程を明確に説明できるところが finite- $U$  slave-boson 法の利点である。

### 3.4.5 コンダクタンスの磁場依存性と AB 振動

#### ・コンダクタンスの磁場依存性

1.2.3 節において、Fano 効果による非対称ピークの裾を引く方向は掃引する磁場によって変化することを見てきた。これは磁場によって両経路の位相差による干渉が変化するためである。図 17 に  $T_b = 0.6$  の場合の Fano-Kondo 形状の磁場依存性を示す。磁場により AB 位相が  $\varphi = 0$  から  $\varphi = \pi$  へ変化すると局在準位と連続準位の干渉が、協力的から相殺的に変化するためにピークの方が反転する。 $\varphi = \pi/2$  の場合、コンダクタンスはドットのエネルギー準位に対して広範囲にわたってユニタリ極限值にとどまり、 $T_b = 0.0$  かつ  $\varphi = 0$  の場合と同様にクーロン相互作用の大きさと同程度の幅のプラトーが形成される。1.2.3 節で、 $\varphi = \pi/2$  の場合には Fano 効果が起きても Breit-Wigner 型の共鳴散乱形状に一致することを述べたが、さらに電子間相互作用の効果が加わった場合でも同様に対称な共鳴形状に一致することがわかった。NRG 法を用いた計算結果でも Fano-Kondo ピークの同様な磁場依存性が確かめられている [5]。

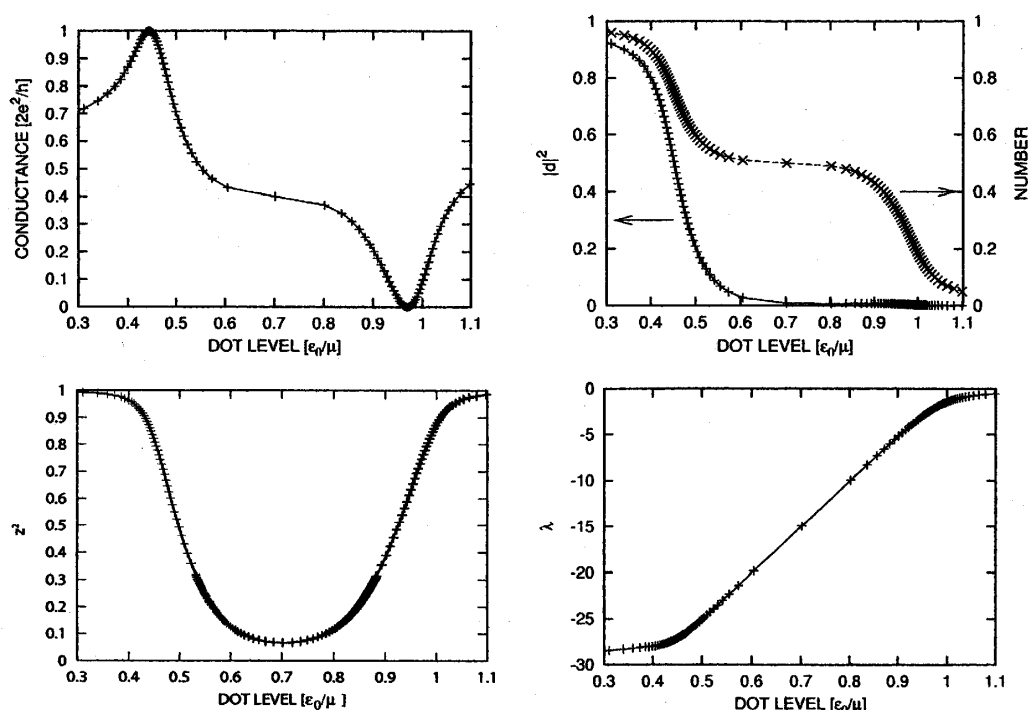


図 15: 左列上:  $T_b = 0.6$  の時のコンダクタンス、左列下: 多体効果を表すパラメタ  $z$ 。右列上: 量子ドット内の電子数  $n$  と二重占有確率を表すパラメータ  $d$ 、右下: Lagrange の未定定数  $\lambda$ 。クーロン相互作用  $U/\Gamma = 30$ 、AB 位相  $\varphi = 0$  と固定した。

#### ・ Aharonov-Bohm 振動と近藤効果

この節では電子間相互作用の AB 振動への影響について考察する。通常の Fano 共鳴が起こる場合には、共鳴点の 1 点だけで AB 振動の位相は  $\pi/2$  に固定され、ピークの前後は連続的に  $\pi$  にシフトする。Fano-Kondo プラトーが形成される場合、つまり近藤状態にある場合にはこの位相シフトは特異的なものになりそれがプラトーの形成に関係している。量子ドット内の電子数を固定して、コンダクタンスをプロットしたものが図 18 である。本研究では、数値計算上の都合で電子数を固定している（それにより量子ドットの準位も決定される）。近藤領域の外 ( $n = 0.2, 0.8$ ) では、コンダクタンスは  $2\pi$  の振動周期を持ち、ユニタリー極限值  $2e^2/h$  には達しない。反対に、近藤領域 ( $n = 0.45 \sim 0.55$ ) ではコンダクタンスは  $\varphi/\pi = 0.5$  でユニタリー極限值に達し、さらに  $n = 0.5$  では振動周期は半分になる（振動数は二倍になる）。近藤状態付近 ( $n = 0.45, 0.55$ ) でも振動周期はほぼ  $\pi$  であり、コンダクタンスに大きな変化はない。つまり AB 振動は、通常は共鳴点にドットのエネルギーを固定した場合のみ  $\varphi/\pi = 0.5$  で最大値を示すが、近藤状態では広範囲において  $\varphi/\pi = 0.5$  近くで最大値を示す。よって、近藤領域では AB 位相が  $\pi/2$  にロックされる。このような変化の下で局在準位と位相変化の小さい連続準位が干渉を起こすために Fano-Kondo プラトーが形成される。つまり、コンダクタンスのプラトーは電子数が変化しない領域で AB 位相が  $\pi/2$  に固定されるため、それに伴い共鳴形状も変化をしないために形成される。他方、ピークを通過する際の AB 振動の変化の様子は電子間相互作用を考慮しない場合の図 7 と似た傾向を示す。線形応答領域で AB 振動の周期が半分になる現象は NRG 法による計算によっても指摘されている [5]。

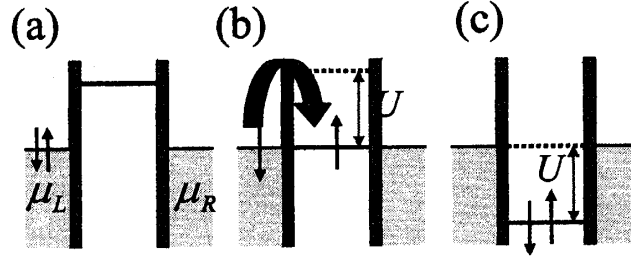


図 16: 量子ドット内のクーロン相互作用が働く場合の電気伝導の模式図。(a) 量子ドットの準位が左右電極のフェルミエネルギーより高い位置にある場合。量子ドットには電子は流れない。(b) 電子がスピンあたり一つだけドット内に流入し、残る一つはクーロン相互作用によって抑制される。(c) 量子ドットの準位が  $U$  だけ下がることによりドット内で二重占有が実現される。

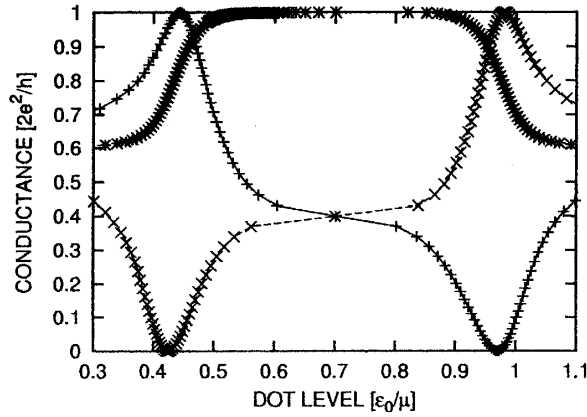


図 17:  $T_b = 0.6$  の場合のコンダクタンスの磁場依存性。近藤状態にある場合も、非対称ピークの裾を引く方向は磁場によって制御できる。それぞれの記号は + :  $\varphi = 0$ , \* :  $\varphi = \pi/2$ , x :  $\varphi = \pi$  を意味する。クーロン相互作用の大きさは  $U/\mu = 0.6$  ( $U/\Gamma = 30$ ) と設定した。

### 3.4.6 非平衡 Fano-Kondo 効果

今までは  $V \rightarrow 0$  という、線形応答領域でのコンダクタンスについて考察してきたが、本節では線形応答領域から外れた時の振る舞いについて考察する。3.3 節で見てきたように、slave-boson mean-field 法では電荷のゆらぎを考慮していないために、非平衡状態を正しく記述できるか否か様々な議論がされている [26, 81]。以下、低温かつ低バイアス領域においては非平衡領域の近藤効果をよく記述できることを示す。

本研究では、左電極のフェルミエネルギーを  $\mu_L = \mu - eV/2$ 、右電極のフェルミエネルギーを  $\mu_R = \mu + eV/2$  とおくことにより、非平衡状態を実現することを考えた。図 19 にバイアス電圧を微小にかけた場合の様々なバックグラウンドの透過確率の値におけるコンダクタンスを示す。 $T_b = 0.0$  におけるコンダクタンスは、バイアス電圧によりプラトー部分が抑制され、ユニタリー極限值から外れる現象が見られた。バックグラウンドの透過確率が増すと ( $T_b = 0.3$ )、Fano 効果により更にプラトー部分が抑制され、非対称ピークにおけるプラトーの一部分のコンダクタンスが上昇した。更に干渉効果の寄与が大きくなるとコンダクタンスのプラトーが徐々に上昇し、本

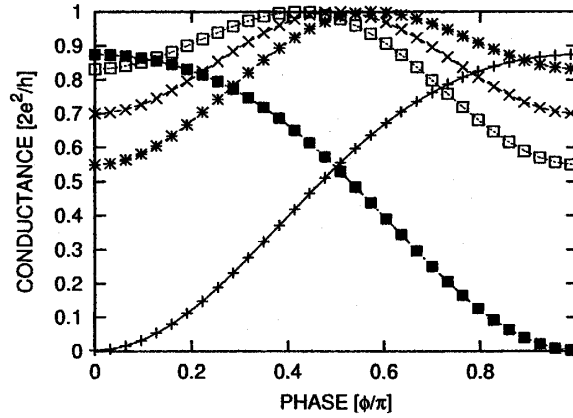


図 18: 電子数を固定した場合の AB 振動。横軸に AB 位相、縦軸にコンダクタンスをとった。それぞれのパラメタは  $T_b = 0.3$ ,  $U/\Gamma = 30$  と固定した。電子数はそれぞれ  $+: n = 0.2$ ,  $*: n = 0.45$ ,  $\times: n = 0.5$ ,  $\square: n = 0.55$ ,  $\blacksquare: n = 0.8$  である。近藤領域近傍とその外側では振動周期（及び周波数）が異なる。

来のプラトー部分に伝導度の山ができ ( $T_b = 0.6$ )、一つの非対称ピークが二つに分裂する様子が見られた。つまり、低バイアス電圧を印加することによって、コンダクタンスのプラトー部分が顕著に影響を受ける。この振る舞いは次のように説明することができる。相互作用を考慮した場合のコンダクタンスは、通常のバイアス電圧  $eV/\Gamma$  に  $1/z^2$  がかけられた有効バイアス電圧の関数である。3.4.4 節で議論したように、多体効果を表すパラメータ  $z$  は、クーロン相互作用が主に効いてくるプラトー領域では小さな値をとる。よって、有効バイアス電圧は、プラトーが形成される領域で通常のバイアス電圧  $eV/\Gamma$  よりも増大する。従って、コンダクタンスのプラトー領域ではバイアス電圧が大きく印加された場合と同様に振舞う。プラトー領域の外側 ( $\epsilon_0/\mu < 0.5$ ,  $\epsilon_0/\mu \geq 1.0$ ) では  $z \approx 1$  であることから、有効バイアス電圧は  $eV/\Gamma$  にほぼ等しく、コンダクタンスの形状は相互作用がない場合と同様になる。さて、電子間相互作用を考慮しないモデルにおいて、バイアス電圧をある程度大きめに印加すると  $T_b = 0.6$  の場合ではコンダクタンスのピークが二つに分裂する形状が見られた。今回も  $T_b = 0.6$  の場合、共鳴ピークが二つに分裂するような現象が見られたが、これはプラトー領域だけに通常のバイアス電圧より大きい有効電圧が印加されたため、電子間相互作用を考慮しない時にバイアス電圧を大きくかけた場合のコンダクタンスに似た振る舞いが現れたと考えることができる。本来ならコンダクタンスが抑制されている領域で、バイアス電圧によりコンダクタンスが上昇する現象が見られたのはこの理由によるものと考えられる。バイアス電圧を印加すると一つの非対称 Fano-Kondo ピークのプラトー部分が二つの非対称 Fano ピークに分裂する現象は、量子細線に量子ドットが結合した系において実験でも観測されている [31]。この場合も上記のような理由でバイアス電圧により近藤効果が抑制されるためと考えられる。

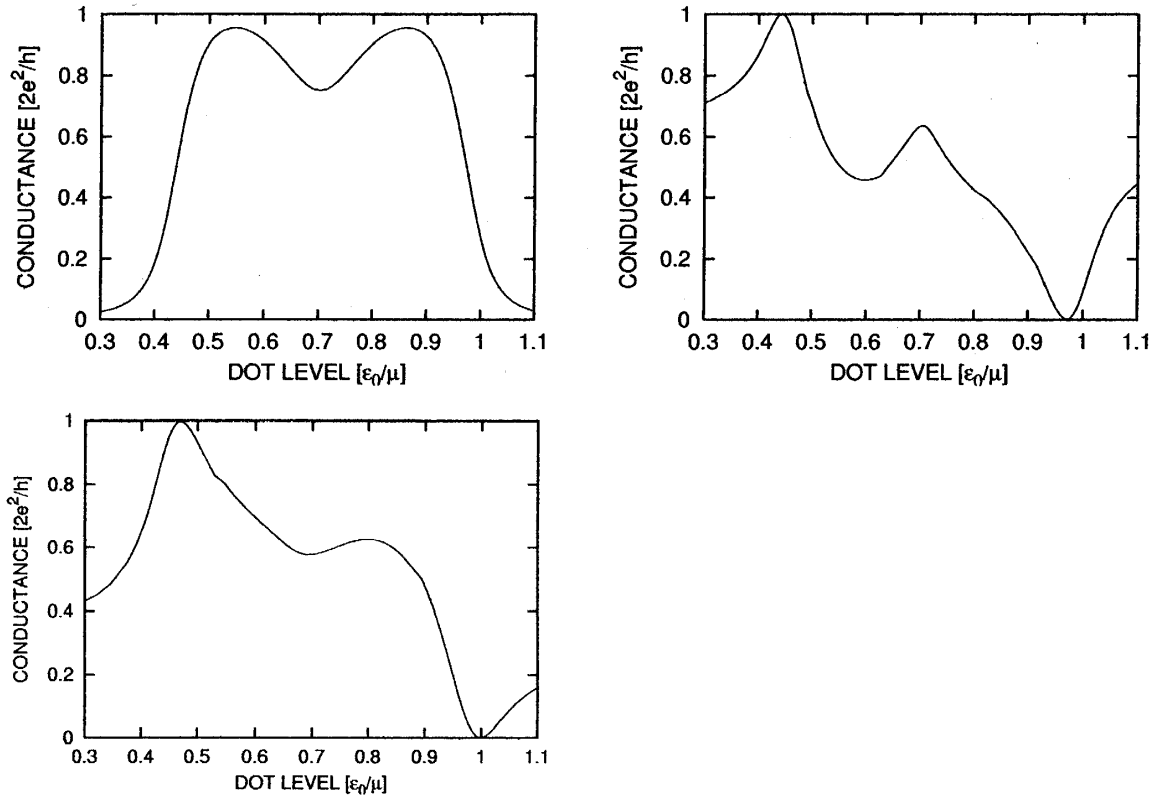


図 19: 非平衡状態における Fano-Kondo 効果。それぞれバックグラウンドの透過確率の値  $T_b$  が異なる。左列上図:  $T_b = 0.0$ 、下図:  $T_b = 0.3$ 。右列上図:  $T_b = 0.6$ 。他のパラメータは  $\varphi = 0$ 、 $U/\mu = 0.6$  及び  $eV/\mu = 0.002$ 。 $T_b = 0.0$  の場合バイアス電圧によりコンダクタンスは抑制されるが、バックグラウンドの透過確率が増すことによりプラトー部分の伝導度が上昇する。 $T_b = 0.3$  以上になると、コンダクタンスのプラトー部分が上昇し、共鳴ピークが二つに分裂する様子が見られる。



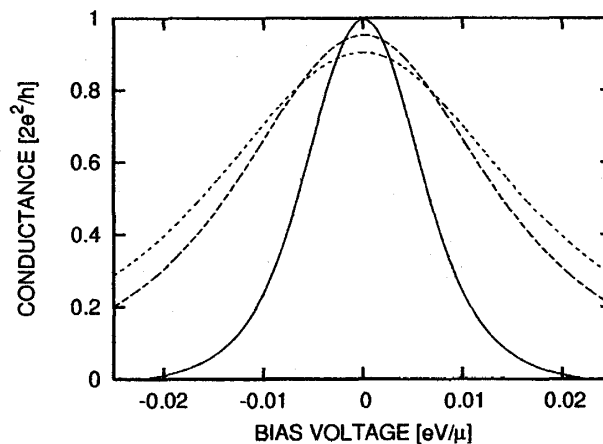


図 20: 量子ドットのみを介する経路単独の場合の伝導度のバイアス依存性。横軸にバイアス電圧、縦軸にコンダクタンスをとった。バックグラウンドの透過確率は  $T_b = 0.0$  で、 $\phi = 0$ 、 $U/\Gamma = 30$  ( $U/\mu = 0.6$ ) と固定した。それぞれの曲線は電子数の違いを表し、 $n = 0.48$  (実線)、 $n = 0.43$  (長いダッシュ線)、 $n = 0.40$  (短いダッシュ線)。近藤状態ではゼロバイスにおいて伝導度は極大値をとる。

### 3.5 コンダクタンスのゼロバイアス極大・極小

本節ではコンダクタンスのバイアス電圧依存性について述べる。1.2.4 節で紹介したように、近藤効果に特徴的な現象の一つとしてゼロバイアス電圧でコンダクタンスが極大ピークをもつことが挙げられる。これは状態密度が電極のフェルミ面にピークを持つことと同等であり、この現象が現れる時、近藤効果が発現していると考えてよい。以下、ゼロバイアス電圧でコンダクタンスに極大値が現れる現象が電極同士の直接結合（バックグラウンドの透過確率の影響）によりどのように変化するかを見ていく。

図 20 に  $T_b = 0.0$  の場合のコンダクタンスのバイアス電圧依存性を示す。それぞれの曲線は量子ドット内の電子数の違いを表している。ドット内の電子状態が近藤状態にある時 ( $n = 0.48$ ) は、コンダクタンスはゼロバイアスでユニタリー極限值 ( $2e^2/h$ ) に達しており、近藤効果に伴うゼロバイアス極大が現れている。ゼロバイアス極大は実験においても観測されている [17, 34]。電子数を  $n = 0.48$  から減らしていくと（これは量子ドットの準位を近藤領域内から外していくことに対応する）ゼロバイアスでの伝導度はユニタリー極限值から減少し、共鳴ピークの幅が広がる。これは近藤状態から外れるにつれて、状態密度がフェルミ面近傍にユニタリー極限值に達するピークをもたなくなることと相当する。これは、バイアス電圧が増加していき左右電極のフェルミエネルギーの差が増加すると、コヒーレンス性が失われ高次のトンネル過程が消滅するためであると考えられている。ところで、B. Dong らが行なった同様の計算 [81] では、近藤温度  $T_k$  をバイアス電圧の単位にとったため近藤領域から外れるにつれてコンダクタンスの幅は狭くなっていく。この二つの結果は一見矛盾しているようだが、本研究の場合でも彼らが用いた  $T_k$  を単位にとると、電子数を  $n = 0.48$  から減少させていくにつれピークの幅が狭くなることが示され、両者は同等である。

図 21、図 22 にバックグラウンドの透過確率の効果を考慮した場合のコンダクタンスのバイアス電圧依存性を示す。 $T_b = 0.45$  の場合、 $n = 0.48$  の時はゼロバイアスでコンダクタンスに極大値を示すが、ユニタリー極限值 ( $G = 2e^2/h$ ) には達しておらず、更に電子数  $n$  が現象するにつれ

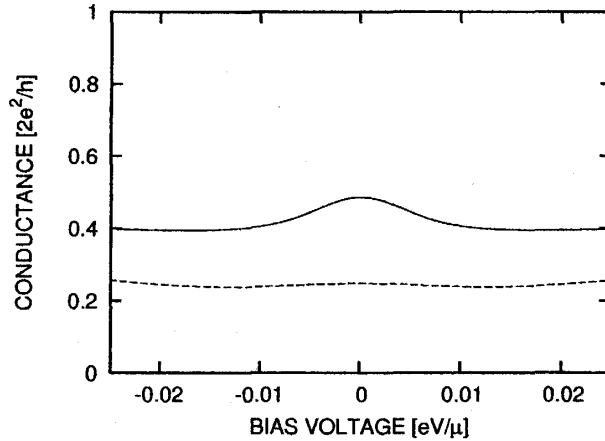


図 21:  $T_b = 0.45$  の場合の伝導度のバイアス依存性。  $T_b = 0.0$  の時と比較すると、近藤領域の外側ではゼロバイアスにおける極大値が消滅する。それぞれの曲線は電子数の違いを表し、  $n = 0.48$  (実線)、  $n = 0.40$  (長いダッシュ線) を示す。他のパラメータは  $\phi = 0$ 、  $U/\Gamma = 30$  ( $U/\mu = 0.6$ ) と固定した。

(近藤領域から外れていくにつれて) ゼロバイアス電圧における極大値が消滅する。  $T_b = 0.6$  の場合はゼロバイアス電圧におけるピークは完全に消滅し、コンダクタンスはディップのみを示す。これは量子ドットを介する経路と、電極が直接結合する経路との干渉に起因し、アームの存在によって Fano 効果が発現して近藤状態が壊されたためと考えられる。ゼロバイアスでコンダクタンスがディップ構造を示す現象は、有限温度の計算で磁場を変化することにより起こり得ることが報告されている [93]。本研究では、絶対零度の場合でかつ磁場をかけない場合でも、二つの経路の干渉効果によりコンダクタンスがゼロバイアスでディップ形状をとる可能性があることを示した。

### 3.6 近藤温度

本節ではコンダクタンスにプラトーが形成される時の近藤温度を見積もり、その結果について述べる。slave-boson mean-field 法におけるパラメータが温度に強く依存せず、かつ  $T_b = 0$ 、  $\varepsilon_0 - \lambda = \mu$  の場合、  $T/(z^2\Gamma) \ll 1$  の範囲で線形応答領域のコンダクタンスは

$$\frac{h}{2e^2}G = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\{ 1 + \left( \frac{Ty}{z^2\Gamma} \right)^2 \right\}^{-1} \frac{e^y}{(e^y + 1)^2} \simeq 1 - \frac{1}{3} \left( \frac{\pi T}{z^2\Gamma} \right)^2 + \frac{7}{15} \left( \frac{\pi T}{z^2\Gamma} \right)^4 + \dots, \quad (86)$$

と表される。経験式 [36] の低温展開

$$\frac{h}{2e^2}G = \left( \frac{(2^{1/s} - 1)T_k^2}{T^2 + (2^{1/s} - 1)T_k^2} \right)^s \quad (87)$$

と比べると、上式より  $s = 5/37$ 、  $T_k \simeq 2.64 \times z^2\Gamma$  と求められる。  $\Gamma/\mu = 0.02$ 、  $U/\mu = 0.6$  の場合、  $z^2 \simeq 0.066$  と求められるので電極のフェルミエネルギーを  $\mu = 9.29 \text{ meV}$  と仮定すると  $T_k \simeq 375 \text{ mK}$  と導出される。(87) 式から近藤温度を見積もる際に、もしクーロン相互作用によるドットの準位幅  $\Gamma$  の減少がなければ近藤温度は上記の値の 10 倍の値になってしまう。つまりこのドット準位

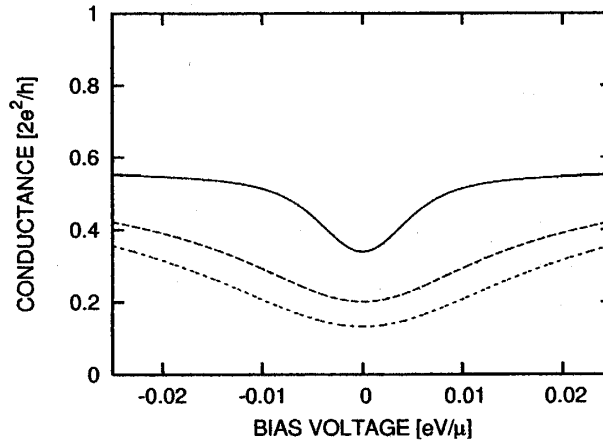


図 22:  $T_b = 0.6$  の場合の伝導度のバイアス依存性。  $T_b = 0.0$  の場合とは反対にゼロバイアスでコンダクタンスが極小を示す。電子数はそれぞれ  $n = 0.48$  (実線)、 $n = 0.43$  (長いダッシュ線)、 $n = 0.40$  (短いダッシュ線) を示す。他のパラメータは  $\varphi = 0$ 、 $U/\Gamma = 30$  ( $U/\mu = 0.6$ ) と固定した

の幅が  $z^2$  により減少することは、近藤温度に本質的に関係していると考えられる。これらの振る舞いから、 $z^2$  によるドット準位幅の減少はコンダクタンスのプラトー領域で近藤一重項を形成していることが示唆される。

### 3.7 クーロン相互作用と Fano 因子

本節では 2.5 節で導入した Fano 因子と近藤効果の関係について述べる。Fano 因子  $\gamma \equiv S(0)/2eJ$  ( $S(0)$  はショットノイズパワースペクトル、 $J$  は電流) はショットノイズのポアソン値  $2eJ$  からのずれを表す。電子間相互作用を考慮した場合、絶対零度の時の電流  $J$  及び振動数  $\omega = 0$  のショットノイズスペクトル  $S(0)$  は以下のように計算できる。

$$J = \frac{e}{h} \sum_{\sigma} \int_{\mu_L}^{\mu_R} d\varepsilon T_{\sigma}(\varepsilon)$$

$$S(0) = \frac{2e^2}{h} \sum_{\sigma} \int_{\mu_L}^{\mu_R} d\varepsilon T_{\sigma}(\varepsilon) (1 - T_{\sigma}(\varepsilon)) \quad (88)$$

ここでも左右電極に対称にバイアス電圧をかける： $\mu_L = \mu_0 - eV/2$ 、 $\mu_R = \mu_0 + eV/2$  と仮定する。積分を実行すると、 $x = 0$  の場合の電流及びショットノイズスペクトルは<sup>2</sup>

$$J_{x=0} = \frac{e}{h} \Gamma z^2 \sum_{\sigma} \left( \arctan \frac{\mu_0 + \frac{eV}{2} - \bar{\varepsilon}_{\sigma}}{\Gamma z^2} - \arctan \frac{\mu_0 - \frac{eV}{2} - \bar{\varepsilon}_{\sigma}}{\Gamma z^2} \right) \quad (89)$$

$$S_{x=0}(0) = \frac{e^2}{h} \sum_{\sigma} \Gamma z^2 \left( \arctan \frac{\mu_0 + \frac{eV}{2} - \bar{\varepsilon}_{\sigma}}{\Gamma z^2} - \arctan \frac{\mu_0 - \frac{eV}{2} - \bar{\varepsilon}_{\sigma}}{\Gamma z^2} \right)$$

$$- \frac{e^2}{h} (\Gamma z^2)^2 \sum_{\sigma} \left( \frac{\mu_0 + \frac{eV}{2} - \bar{\varepsilon}_{\sigma}}{(\mu_0 + \frac{eV}{2} - \bar{\varepsilon}_{\sigma})^2 + (z^2 \Gamma)^2} - \frac{\mu_0 - \frac{eV}{2} - \bar{\varepsilon}_{\sigma}}{(\mu_0 - \frac{eV}{2} - \bar{\varepsilon}_{\sigma})^2 + (z^2 \Gamma)^2} \right) \quad (90)$$

<sup>2</sup> $x = \pi^2 W^2 u_L^2 \rho_L u_R^2 \rho_R = 0$  はバックグラウンドの透過確率  $T_b$  に関する量で、 $x = 0$  なら  $T_b = 4x/(1+x)^2 = 0$  を示す

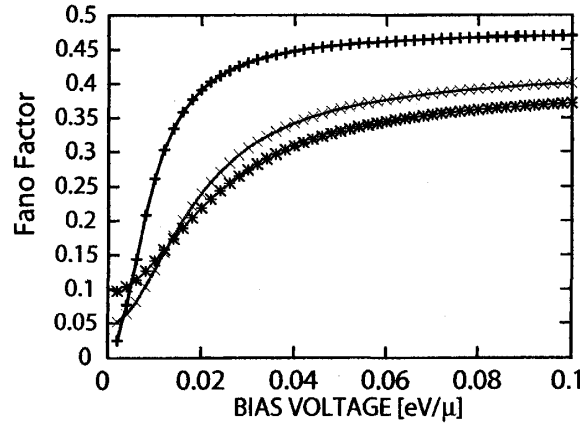


図 23:  $T_b = 0.0$  の場合の Fano 因子。横軸にバイアス電圧、縦軸に Fano 因子をとったもの。近藤領域 ( $n = 0.48$ ) では、低バイアス電圧で  $\gamma \simeq 0$  となり、バイアス電圧が大きくなると  $\gamma = 0.5$  に漸近する様子が見られる。近藤領域の外側では、低バイアス側では  $\gamma = 0$  より上昇する。クーロン相互作用  $U/\Gamma = 30.0$  ( $U/\mu = 0.6$ )、AB 位相  $\phi = 0$ 。それぞれの曲線は電子数の違いを表す： $n = 0.48$  (記号 + の実線)、 $n = 0.43$  (記号 × の点線)、 $n = 0.40$  (記号 \* の実線)

と計算される。但しここでも  $z = z_\sigma (\sigma = \pm)$  とした。図 23 に  $T_b = 0$  ( $x = 0$ ) の場合の Fano 因子のバイアス電圧依存性を示す。図 23 より電子数が  $n = 0.48$  の場合、つまり近藤状態にある場合では、ゼロバイアス電圧付近で Fano 因子は 0 に近づいている。このことは以下のように説明できる。Fano 因子の表式 (88) によるとバイアス電圧が非常に小さい極限では被積分関数の  $\varepsilon$  依存性を落としてよく、 $J$  と  $S(0)$  はそれぞれ透過確率を用いて  $T$ 、 $T(1-T)$  と表されるので Fano 因子は  $\gamma = S(0)/2eJ = T(1-T)/T = 1-T$  となる。 $n = 0.48$  では近藤状態が実現されているため、コンダクタンスはゼロバイアスに極大値を持ち  $T = 1$  であったことを思い出すと、ゼロバイアスでは  $\gamma = 1-1 = 0$  をとり、連続性より低バイアス側で Fano 因子  $\gamma$  は小さくなる。量子ドットのみを介する経路単独の場合 ( $T_b = 0$  の場合)、 $eV \rightarrow \infty$  の極限で  $\gamma \rightarrow 0.5$  となることが理論計算で示されており [94]、図 23 から確かにそのような振る舞いをする事がわかる。 $n = 0.40$  の時はゼロバイアスで  $T \approx 0.9$  を示していたので、バイアス電圧  $V$  が 0 に近づくにつれ Fano 因子は  $\gamma = 1-0.9 = 0.1$  を示すはずであるが、確かにそのような振る舞いを示している。単独の量子ドットを電極につないだ系での Fano 因子の同様な振る舞いは他の研究でも報告されている [69, 70]。次に、アームの寄与が大きくなる場合、複合系の Fano 因子はどのような振る舞いを示すかを考察する。図 24 に  $T_b = 0.3$  の場合の Fano 因子のバイアス電圧依存性を示す。 $T_b = 0.0$  の場合とはまったく異なる振る舞いをしており、ゼロバイアスで最大値をとり、 $n = 0.48$  ではポアソン値に近づく。これはアームによる干渉効果が加わるために Fano 共鳴によって近藤効果が壊され、コンダクタンスがユニタリー極限值からずれるためである。バイアス電圧が増加すると非平衡 Fano-Kondo 効果のためにプラトー部分のコンダクタンスが上昇し、一旦、透過確率が上昇するためにその領域だけ Fano 因子が抑えられると考えられる。アームの干渉効果により近藤ピークがゆがめられ、その結果 Fano 因子が従来の  $T_b = 0$  の場合の振る舞いとは異なる様相を示す。

以上見てきたように、slave-boson 法と平均場法を利用して、絶対零度かつ低バイアス領域では近藤効果に特徴的なゼロバイスでコンダクタンスが極大値を示すことなどが説明できることがわかった。本研究で、Kotliar らが提案した slave-boson mean-field 法は線形応答が成立しない領域にも拡張可能であることを示すことができたと考えられる。

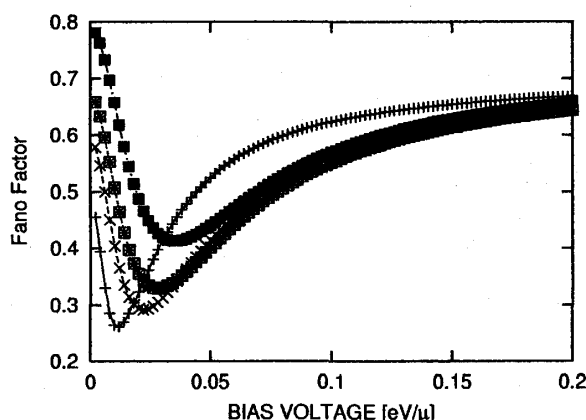


図 24:  $T_b = 0.3$  の場合の Fano 因子。  $T_b = 0.0$  の場合とは異なった振る舞いをする。クーロン相互作用  $U/\Gamma = 30.0$  ( $U/\mu = 0.6$ )、AB 位相  $\phi = 0$ 。それぞれの曲線は電子数の違いを表し、 $n = 0.48$  (記号■の点線)、 $n = 0.45$  (記号×の点線)、 $n = 0.43$  (記号□の点線)、 $n = 0.40$  (記号+の実線)。

### 3.8 第3章のまとめ

本章ではクーロン相互作用を取り入れたモデルを用い、AB リングに量子ドットを埋め込んだ系の電気伝導現象を Kotliar らの finite- $U$  slave-boson mean-field 法を使って議論した。得られた結果を以下にまとめる。

- ① finite- $U$  slave-boson mean-field 法を用い、系のハミルトニアンを bilinear の有効ハミルトニアンに書き換え、その漸近場の演算子を導出し、平均場ハミルトニアンに関する非平衡定常状態を構成した。
- ②線形応答領域における Fano-Kondo 形状、AB 振動を導出し、Hofstetter らが NRG 法を用いて導出した結果と非常によく一致する結果を得た。
- ③導入したボゾン演算子などの振る舞いから Fano-Kondo プラトートの形成過程を量子ドット内の輸送現象に矛盾無く説明することができた。
- ④近藤状態では AB 振動の位相シフトが  $\pi/2$  にロックすることを再現した。また、共鳴ピークをまたぐ時に AB 振動の位相が  $\pi$  変化する様子が電子間相互作用を考慮しない場合と非常によく似ていることを示した。
- ⑤磁場によって Fano-Kondo 効果の非対称ピークの裾の方向が反転することを再現した。磁場により裾の方向が反転する現象は、クーロン相互作用の有無とは独立である。
- ⑥非平衡 Fano-Kondo 効果による伝導度の形状変化を調べ、バイアス電圧によって近藤領域におけるコンダクタンスが抑制され、Fano-Kondo ピークではプラト一部分が上昇し二つのピークに分裂する現象が見られることを示した。
- ⑦近藤効果に特徴的なゼロバイアスにおいてコンダクタンスが極大値を示す現象を再現し、アームによる干渉効果が加わるとゼロバイアスで極小値をとる可能性があることを指摘した。
- ⑧近藤温度を見積もり、近藤の谷の領域において実験で得られている値とほぼ等しい値を得ることができた。
- ⑨ Fano 因子に対するクーロン相互作用の影響を検討し、近藤効果との関係を調べた。アームの干渉効果により Fano 因子が従来の振る舞いと異なるものを示す可能性があることを示した。
- ⑩平均場法を用いた計算は、絶対零度かつ低バイアス領域では非平衡性の強い領域においても有用であることを示した。

## 4 結論

本研究では、無限量子系を扱う上で有用な手法である C\* 代数の方法を用い、量子ドットを埋め込んだ AB リング複合系における電子のコヒーレント伝導を、電子間相互作用を考慮しない場合と電子間相互作用を取り入れた場合の両方について調べた。

### (i) 量子複合系における非平衡 Fano 効果

電子間相互作用を考慮しない場合、漸近場の演算子を導出し、系の非平衡定常状態を厳密に構成した。非平衡定常状態の特徴として、量子ドットから離れた十分遠方では熱平衡分布を回復すること、及び相対エントロピー生成量が定常状態で常に正であることを示した。連続準位と離散準位の結合によって生じる Fano 効果を再現し、非平衡状態での Fano 効果、AB 振動の振る舞いを詳細に調べた。電気伝導に関する量として電流ゆらぎを導き、ゆらぎが Fano ピークによって抑えられることと Fano ピークが対称性を示す  $\varphi = \pi/2$  の場合にも、ゆらぎには干渉効果が現れることを示した。更に、Fano 因子を線形応答領域、非平衡領域の両方にあたって導出し、Fano 共鳴ピークとの関係を説明した。線形応答領域で成立することが知られていた、久保公式を非平衡系に拡張し、補正項が現れることを示した。線形応答領域の議論から、実験で観測されている Fano 効果などの振る舞いと同様な傾向を示せたことにより量子系における電気伝導を計算する際に C\* 代数の方法が有用であることを示すことができた。

### (ii) 量子複合系における Fano-Kondo 効果

電子間相互作用を取り入れた場合には、多体相関を表すハミルトニアンを、Kotliar らの finite- $U$  slave-boson mean-field 法を用いて bilinear の有効ハミルトニアンに書き換え、そのハミルトニアンに関する非平衡定常状態を厳密に構成した。線形応答領域の Fano-Kondo 効果を調べ、干渉効果である Fano 効果によって、ユニタリー極限値に達していたコンダクタンスがゆがめられることを示し、Fano 形状の共鳴散乱点がクーロン相互作用によって大きく引き伸ばされることを示した。これらの結果は Hofstadter らによって計算された NRG 法を用いた結果を非常によく再現する。Fano-Kondo プラトートの形成過程は slave-boson 法で導入したボゾン演算子や電子数などの物理パラメータによって説明することができ、それらのパラメータを用いると、電子が一つずつトンネルしていく様子が自然に記述できることを示した。線形応答領域での AB 振動を調べ、近藤領域の振動周期が近藤領域外の半分になることから、位相シフトは近藤領域において  $\pi/2$  に固定されることを示した。非平衡状態での Fano-Kondo 効果の振る舞いを調べ、コンダクタンスがユニタリー極限値に達している領域ではバイアス電圧によりコンダクタンスが抑制されること、非対称 Fano-Kondo 効果が生じている領域ではバイアス電圧により上昇する（つまりゼロバイアスに極小値が現れる）ことを示した。この結果から、干渉効果が近藤効果を抑制していると考えられる。更に近藤状態での Fano 因子を調べ、干渉効果により Fano 因子が大きく異なる形状を持つことを示した。以上から slave-boson mean-field 法が、非平衡性が強い領域の Fano-Kondo 効果をよく記述することがわかった。

## 謝辞

本研究を遂行するにあたって多くの方々に助言をいただき、論文を執筆することができました。この場をお借りしましてお礼を申し上げます。

指導教員の田崎秀一教授には  $C^*$  代数法を利用した興味深い研究課題、研究環境を与えていただきまして大変お世話になりました。本研究を遂行するにあたって数々の御指導、御助言を頂きました。心より深く御礼を申し上げます。

慶応大学の江藤幹雄助教授には近藤効果の講義から著者の研究に対する助言まで幅広く御指導を頂きました。メゾスコピック系の幅広い知識を得ることができて深く感謝しております。Bari 大学の Saverio Pascazio 教授には研究に関する多くの有意義な議論や著者の進路に対しても多くの助言を頂き、大変感謝しております。東京大学物性研究所の勝本信吾教授には最新の実験結果を教えていただき、本研究に関する議論をしていただきました。深く御礼申し上げます。東京大学物性研究所の加藤岳生助教授には本研究に関する議論をして頂き、更に様々な文献を教えて頂きまして大変感謝しております。東京大学の樽茶清吾教授にはメゾスコピック系の基礎から最近の研究まで幅広く教えていただき、更に半年間、早稲田大学での講義の際に大変お世話になりました。Goettingen 大学の Volker Meden 教授には研究内容に関する多くの御助言を頂き、大変感謝しております。更に彼らの最新の理論データを送っていただいたことに心から御礼申し上げます。

相川恒博士と佐藤政寛氏には東京大学大学院理学研究科勝本研究室で行なわれた興味深い実験内容を教えていただき、著者の計算結果と比較検討するために相川博士の博士論文と佐藤氏の修士論文を引用させていただきました。そして、本研究を遂行するにあたって、田崎研究室及び他の物理・応物の研究室の院生の皆様には大変お世話になりました。数値計算を行う上で多くの助言をいただいた田崎研究室の藤吉正人氏、徳世明氏には大変感謝しております。大場・中里研究室（現東北大学）の木村元博士には研究内容から研究生活にわたることまで広く相談にのっていただきまして大変感謝しております。最後に、本研究は早稲田大学 21 世紀 COE プログラム「多元要素からなる自己組織系の物理」の援助のもとに成り立っています。

## 付録 A Fano 効果

Fano 効果は離散準位と連続準位が結合する際に発現する現象として知られている。分光学の分野のみならず量子ドット系などのメソスコピック系における電気伝導でも観測されており、普遍的に発現する現象と言われている。本研究で扱った量子ドットを埋め込んだ AB リング系の他にも、単層カーボンナノチューブや多層カーボンナノチューブにおける Fano 効果の研究が実験 [95, 96]、理論 [97, 98] とともに行われている。

本付録では Fano のオリジナルの論文の中で最も簡単なモデルを考察する。連続準位  $\psi_{E'}$  と離散準位  $\phi$  にそれぞれ一つずつ状態が存在し、両者が結合した系を考える。各々の状態は縮退していないと仮定する。ハミルトニアン  $H$  の行列要素は以下で与えられるとする。

$$\begin{aligned}(\phi|H|\phi) &= E_\phi \\(\psi_{E'}|H|\phi) &= V_{E'} \\(\psi_{\tilde{E}}|H|\psi_{E'}) &= E' \delta(E' - \tilde{E})\end{aligned}\tag{91}$$

但し、 $V_{E'}$  は離散準位と連続準位の配置間相互作用であり、離散準位のエネルギー  $E_\phi$  は連続準位のエネルギー  $E'$  の中に埋め込まれている状態を考える。ハミルトニアン  $H$  の固有状態を以下のように仮定する。

$$\Psi_E = a\phi + \int dE' b_{E'} \psi_{E'}\tag{92}$$

ここで係数、 $a$  と  $b_{E'}$  はそれぞれ  $E$  関数である。(91) 式と (92) 式を使用すると次の連立方程式が得られる。

$$E_\phi a + \int dE' V_{E'}^* b_{E'} = E a\tag{93}$$

$$V_{E'} a + E' b_{E'} = E b_{E'}\tag{94}$$

上式より  $b_{E'}$  は、

$$b_{E'} = \left[ \frac{1}{E - E'} + z(E) \delta(E - E') \right] V_{E'} a\tag{95}$$

とおくことができる。 $z(E)$  は後に決定する実数関数である。(94) 式に (95) 式を代入すると、以下の関係が得られる。

$$E_\phi + F(E) + z(E) |V_E|^2 = E\tag{96}$$

上式を利用すると、 $z(E)$  が

$$z(E) = \frac{E - E_\phi - F(E)}{|V_E|^2}\tag{97}$$

と導出される。但し、

$$F(E) = P \int dE' \frac{|V_{E'}|^2}{E - E'}$$

である。 $P$  は主値積分を表す。共鳴は  $E = E_\phi + F(E)$  のところで起こるため、 $F(E)$  は  $E_\phi$  に関する共鳴位置のずれを表す。 $\Psi_E$  の規格化： $(\Psi_E|\Psi_E) = \delta(E - \tilde{E})$  及び (95) 式と (96) 式を用いると係数  $a(E)$  と  $b_{E'}$  は次のように求められる。

$$\begin{aligned}a(E) &= \frac{\sin \Delta}{\pi V_E} \\b_{E'} &= \frac{V_{E'}}{\pi V_E} \frac{\sin \Delta}{E - E'} - \cos \Delta \delta(E - E') \frac{V_{E'}}{V_E}\end{aligned}\tag{98}$$



ここで  $\Delta$  は

$$\Delta = -\arctan \frac{\pi |V_E|^2}{E - E_\phi - F(E)} \quad (99)$$

であり、 $\psi_E$  と状態  $\phi$  の配置間相互作用によって得られる位相シフトを表す。

次に、ある始状態  $i$  が遷移  $T$  によって終状態  $\Psi_E$  になる確率を考える。その確率は

$$(\Psi_E|T|i) = \frac{\sin \Delta}{\pi V_E^*} (\phi|T|i) + \frac{1}{\pi V_E^*} P \int dE' \frac{V_{E'}^* \sin \Delta}{E - E'} (\psi_{E'}|T|i) - (\psi_E|T|i) \cos \Delta \quad (100)$$

と表される。ここで

$$\Phi = \phi + P \int dE' \frac{V_{E'}^* \psi_{E'}}{E - E'} \quad (101)$$

とおくと、

$$(\Psi_E|T|i) = \frac{\sin \Delta (\Phi|T|i)}{\pi V_E^*} - (\psi_E|T|i) \cos \Delta \quad (102)$$

$\Phi$  は連続準位と離散準位との混合によって修正された離散準位である。(99) 式より、 $\Delta$  は  $E = E_\phi - F(E)$  の付近で大きく変化をすることがわかる。また (102) 式から、 $\sin \Delta$  と  $\cos \Delta$  は  $E - (E_\phi + F(E))$  に関してそれぞれ偶関数と奇関数なので、(102) 式は共鳴点  $E = E_\phi + F(E)$  の左右で強め合うまたは弱め合うの干渉を引き起こす。このことにより Fano 効果の非対称性が現れる。また、遷移確率が  $E = E_0$ 、 $\Delta = \Delta_0$  の時に 0 をとると仮定すると、(102) 式より

$$\tan \Delta_0 = \frac{\pi V_{E_0}^* (\psi_{E_0}|T|i)}{(\Phi|T|i)} \quad (103)$$

となる。系全体の遷移確率  $|(\Psi_E|T|i)|^2$  を連続準位の遷移確率  $|(\psi_E|T|i)|^2$  で規格化したものは、以下のようにまとめることができる。

$$\frac{|(\Psi_E|T|i)|^2}{|(\psi_E|T|i)|^2} = \frac{|q + \varepsilon|^2}{1 + \varepsilon^2} \quad (104)$$

ここで

$$\varepsilon = -\cot \Delta = \frac{E_\phi - E - F(E)}{\pi |V_E|^2}$$

$$q = \frac{(\Phi|T|i)}{\pi V_E^* (\psi_E|T|i)} \quad (105)$$

とおいた。 $q$  は Fano のパラメータであり非対称形状を特徴づけるパラメータとされている。Fano のオリジナルの論文でも記述されているが  $q = 0$  の時は伝導度は対称なディップ構造を示し、 $|q| \rightarrow \infty$  では Breit-Wigner 型の共鳴散形状となる。Fano のオリジナルの論文ではこのパラメータは実数値にとっているが、磁場により系が時間反転対称性を破る場合には複素数に拡張すべきであることが指摘されている [6]。

## 付録B Aharonov-Bohm 効果

Aharonov-Bohm 効果 [99, 100, 101] とは、電子が通過する経路上に磁場が存在しなくてもベクトルポテンシャルにより二つの電子の経路間で干渉の影響が現れる現象のことを言う。ベクトルポテンシャルの効果により電子の位相が変化し、その結果両経路の干渉に強弱が生じる。電子の位相は磁場に比例した形で書ける。AB 効果は最初に Webb らによって、金属の蒸着による回路を使用して観測された [102]。AB リングは電子の波動性があらわになる系として知られている。

AB リング中に磁場（ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ ）を通し、電子が  $C_1$  の経路と  $C_2$  の経路を通過する状況を考える。この場合の位置  $\mathbf{r}$  の磁場中の電子の運動方程式は

$$\left[ \frac{\{\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})\}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (106)$$

と表され、この方程式の解は、磁場が存在しない時の波動関数を  $\psi_0$  として以下のように求められる。

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv \psi_0(\mathbf{r}) \exp \left\{ \frac{-ie}{\hbar} \int_{r_0}^r d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{l}) \right\} \quad (107)$$

但し、電子が二つの経路に分岐するリング上の点を  $r_0$  とおいた。この場合二つの経路を通過する電子には位相差が生じ、その差  $\Delta\theta$  は (107) 式とストークスの定理によると、

$$\begin{aligned} \Delta\theta &= \frac{e}{\hbar} \left\{ \int_{C_1} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{l}) - \int_{C_2} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{l}) \right\} \\ &= 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \end{aligned} \quad (108)$$

と求められる。ここで  $\Phi_0$  は磁束量子と呼ばれるもので  $\Phi_0 = h/e$  である。磁場  $\Phi$  の関数とすると、干渉の様子が周期  $h/e$  で変化する。これは AB 効果と呼ばれている現象である。電子がコヒーレンス性を保ってリングを伝導する場合、コンダクタンスは上記の  $\Delta\theta$  の関数として表されるため磁場を掃引することによって周期  $h/e$  で振動する (AB 振動)。この AB 振動が観測される時は、リングの上下二つの半円を進む電子がたがいにコヒーレントな関係にある時である。例えば量子ドットを下半円の経路に埋め込んだ系において、電子が下半円の経路を通過する際に量子ドット内の他の電子状態を変化させた場合、反対に両経路はインコヒーレントの関係にあるという。電子が系を通過する際に、他の電子の状態を変化させるような過程があると電子のコヒーレンスは破壊される。

## 付録C 漸近場の導出方法

本付録に、本文 2.3 節で導出した漸近場の演算子の詳細な導出方法を記述する。両電極に関する漸近場の演算子はそれぞれもとの電極に関する演算子  $a_{k\sigma r}$ 、及び量子ドット内の電子状態を記述する演算子  $c_\sigma$  の運動方程式より導出することができる。

各々の電子状態に関するハイゼンベルグの運動方程式は、

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a}_{k\sigma L} &= \omega_{kL} a_{k\sigma L} + u_{kL} c_\sigma + \int dq W u_{kL} u_{qR} e^{i\varphi} a_{q\sigma R} \\ i\hbar \dot{a}_{q\sigma R} &= \omega_{qR} a_{q\sigma R} + u_{kR} c_\sigma + \int dk W u_{kL} u_{qR} e^{-i\varphi} a_{k\sigma L} \\ i\hbar \dot{c}_\sigma &= \tilde{\epsilon}_0 c_\sigma + \int dk u_{kL} a_{k\sigma L} + \int dq u_{qR} a_{q\sigma R} \end{aligned} \quad (109)$$

と記述される。次に、漸近場の演算子  $\beta_{k\sigma r}$  はもとの電子の演算子を基底にして、以下のように展開できると仮定する。

$$\beta_{k\sigma r} = a_{k\sigma r} + f_k c_\sigma + \int dk' g_{kk'} a_{k'\sigma L} + \int dk' h_{kk'} a_{k'\sigma R} \quad (110)$$

この漸近場に関する演算子の運動方程式は自由場に関するものと一致する、すなわち運動方程式  $i\hbar \dot{\beta}_{k\sigma r} = \omega_{kr} \beta_{k\sigma r}$  を満たす。(110) 式を (109) 式に代入し、両辺の係数を比較すると (ここでは  $r=L$  のみを示す)、

$$\begin{aligned} \underline{c_\sigma \text{ の係数}}: (\omega_{kL} - \tilde{\epsilon}_0) f_k &= u_{kL} + \int dk' g_{kk'} u_{k'L} + \int dq h_{kq} u_{qR} \\ \underline{a_{k'\sigma L} \text{ の係数}}: g_{kk'} &= \frac{u_{k'L}}{\omega_{kL} - \omega_{k'L} - i0} (f_k + W e^{-i\varphi} \int dq h_{kq} u_{qR}) \\ \underline{a_{k'\sigma R} \text{ の係数}}: h_{kq} &= \frac{u_{qR}}{\omega_{kL} - \omega_{qR} - i0} (f_k + W e^{i\varphi} u_{kL} + W e^{i\varphi} \int dk' g_{kk'} u_{k'L}) \end{aligned} \quad (111)$$

$\gamma_k \equiv \int dk' g_{kk'} u_{k'L}$  及び  $\eta_k \equiv \int dq h_{kq} u_{qR}$  と定義して、 $M_r(\omega_{kL}) = \int dk' \frac{u_{k'r}^2}{\omega_{kL} - \omega_{k'r} - i0}$  とおき (但し  $r=L, R$ )、 $\gamma$  及び  $\eta$  に関する連立方程式を解くと、 $f_k = \frac{u_{kL}}{\Lambda(\omega_{kL})} (1 + W e^{i\varphi} M_L(\omega_{kL}))$  と定まる。ここでは、 $\Lambda(\omega_{kL}) \equiv v(\omega_{kL})(\omega_{kL} - \tilde{\epsilon}_0) - (M_L(\omega_{kL}) + M_R(\omega_{kL})) - 2W \cos \varphi M_L(\omega_{kL}) M_R(\omega_{kL})$ 、 $v(\omega_{kL}) \equiv 1 - W^2 M_L(\omega_{kL}) M_R(\omega_{kL})$  と定めた。同様に  $g_{kk'}$ 、 $h_{kq}$  をそれぞれ求めると漸近場の演算子  $\beta_{k\sigma r}$  は以下のように求まる。

$$\beta_{k\sigma r} = a_{k\sigma r} + \int dk' \left\{ \frac{u_{kr} u_{k'r} a_{k'\sigma r}}{\omega_{kr} - \omega_{k'r} - i0} \frac{\xi_r(\omega_{kr})}{\Lambda(\omega_{kr})} + \frac{u_{kr} u_{k'r} a_{k'\sigma \bar{r}}}{\omega_{kr} - \omega_{k'r} - i0} \frac{\kappa_r(\omega_{kr})}{\Lambda(\omega_{kr})} \right\} + \frac{\chi_r(\omega_{kr})}{\Lambda(\omega_{kr})} u_{kr} c_\sigma \quad (112)$$

それぞれの記号は本文中の (25) 式と同じものである。次に、 $\beta_{k\sigma r}$  の定常状態での相関関数を計算する。求めた漸近場の演算子を用いると以下のような結果が得られる。

$$e^{-i(\omega_{kr} - \omega_{k'r})t} \langle \beta_{k'\sigma' r'}^\dagger \beta_{k\sigma r} \rangle_0 \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \delta_{\sigma\sigma'} \delta(k - k') \delta_{rr'} F_r(\epsilon) \quad (113)$$

$F_r(\epsilon)$  は電極の状態を記述するフェルミディラック分布関数であり、初期状態 (両電極と量子ドットが結合されておらず、孤立状態にある時) は電極はフェルミディラック分布関数をとると仮定した。ここで (113) 式の左辺は電極に関する演算子  $a_{k\sigma r}$  と量子ドットの状態を表す演算子  $c_\sigma$  から成る漸近場の演算子で記述されるが、右辺の非平衡定常状態では量子ドットに関する記述がないように見える。これは初期状態  $t=0$  で電極と量子ドットを結合させた結果、非平衡定常状態では量子ドットの孤立状態は電極の状態に吸収されたと考えることができる。つまり、系は束縛状態をもたなくなる。先の記述では漸近場の演算子  $\beta_{k\sigma r}$  をもとの演算子  $a_{k\sigma r}$  と  $c_\sigma$  で表すことを試みたが、逆にもとの演算子を漸近場の演算子で展開することを考える。漸近場の演算子、 $\beta_{k\sigma r}$  は完全系をなすことから、非平衡定常状態に到達する前の時間  $t$  での状態を記述する演算子、 $c_\sigma(t)$  を以下のように漸近場の演算子を基底として展開することができる。

$$c_\sigma(t) = \int dk (X_k \beta_{k\sigma L} + Y_k \beta_{k\sigma R}) \quad (114)$$

$c_\sigma$  と  $\beta_{k\sigma r}$  の反交換関係から

$$\begin{aligned} X_k^* &= \frac{u_{kL}}{\Lambda(\omega_{kL})} (1 + W e^{i\varphi} M_R(\omega_{kL})) \\ Y_k^* &= \frac{u_{kR}}{\Lambda(\omega_{kR})} (1 + W e^{-i\varphi} M_L(\omega_{kR})) \end{aligned} \quad (115)$$

が導かれ、時間  $t$  における量子ドットの演算子は

$$c_\sigma(t) = \int dk \left( \frac{u_{kL}\chi_r(\omega_{kL})^*\beta_{k\sigma L}}{\Lambda(\omega_{kL})^*} e^{-i\omega_{kL}t} + \frac{u_{kR}\chi_r(\omega_{kR})^*\beta_{k\sigma R}}{\Lambda(\omega_{kR})^*} e^{-i\omega_{kR}t} \right) \quad (116)$$

と求められる。 $a_{k\sigma r}(t)$  も  $c_\sigma(t)$  と同様に  $\beta_{k\sigma r}$  を基底として展開すると以下のように求められる。

$$a_{k\sigma r}(t) = \beta_{k\sigma r} + \int dk' \left( \frac{u_{kr}u_{k'r}e^{-i\omega_{k'r}t}}{\omega_{k'r} - \omega_{kr} + i0} \frac{\xi_r(\omega_{k'r})^*\beta_{k'\sigma r}}{\Lambda(\omega_{k'r})^*} + \frac{u_{kr}u_{k'\bar{r}}e^{-i\omega_{k'r}t}}{\omega_{k'\bar{r}} - \omega_{kr} + i0} \frac{\kappa_r(\omega_{k'\bar{r}})^*\beta_{k'\sigma\bar{r}}}{\Lambda(\omega_{k'\bar{r}})^*} \right) \quad (117)$$

但し  $\chi_r(x) = 1 + We^{i\varphi_r}M_r(x)$ ,  $\kappa_r(x) = 1 + We^{i\varphi_r}(x - \tilde{\epsilon}_0)$ 、

$\Lambda(x) = v(x)(x - \tilde{\epsilon}_0) - \sum_r M_r(x) - 2W \cos \varphi M_L(x)M_R(x)$ ,  $v(x) = 1 - W^2 M_L(x)M_R(x)$ 、

$\xi_r(x) = 1 + M_r(x)\{W^2(x - \tilde{\epsilon}_0) + 2W \cos \varphi\}$ ,  $M_r(x) = \int d\tilde{k} \frac{u_{kr}^2}{x - \omega_{kr} - i0}$

であり、 $\bar{L} = R, \bar{R} = L$ ,  $\varphi_L = \varphi$ ,  $\varphi_R = -\varphi$  と表した。定常電流を求めるには、上記のようにもとの演算子を漸近場の演算子で展開し、非平衡定常状態での相関関数  $\langle a_{k\sigma L}^\dagger c_\sigma \rangle$ ,  $\langle a_{k\sigma L}^\dagger a_{q\sigma R} \rangle$  に代入する。(113) 式の二点相関関数を利用すると、非平衡定常電流は本文 2.4 節で示したように、ランダウアー公式の形にまとめられる。

## 付録 D 非平衡定常状態への C\* 代数法的アプローチ

非平衡定常状態を構成する際の C\* 代数法の適用について、本文 2.3 節の補足を述べる。C\* 代数の最初の出発点としては、代数上の状態を記述する物理量の局所的演算子の組を用意し、半無限系の左右電極(熱浴)とそれに比べて小さな有限の系を結合させることを考える。もし、電極と有限系の結合相互作用が及ぶ範囲が有限であるならば、外界を含めた系全体の全ハミルトニアン  $H$  と物理量を表す局所演算子  $A$  による交換子  $i[H, A]$  は有限なので局所的に成立し、ハイゼンベルグの運動方程式  $\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[H, A]$  を記述することができる。更に演算子の時間発展  $A(t)$  も局所的範囲で扱える。局所演算子  $A$  の平均を記述するために、ある物理状態  $\rho$  を導入し、その状態での平均を  $\langle A \rangle_\rho$  と記述する。そのように考えると系の長時間の振る舞いは  $\langle A \rangle_{\rho(t)}$  に関して記述できる。つまり局所演算子  $A$  に対する長時間極限、 $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \langle A \rangle_{\rho(t)} = \langle A \rangle_{\rho_\pm}$  となるような弱極限の意味での  $\rho_\pm$  の存在を定義することができる。これは半無限系の電極やそれに結合された小さな有限系の分割の仕方によらず、全系の初期状態  $\rho_0$  から出発して時間発展させた状態は  $|t| \rightarrow \infty$  で唯一の quasifree な定常状態 (Wick の定理が成立し、二点間相関関数によって記述される状態) に弱収束する。このように考えると無限系では数学的に定義できない、ハミルトニアンや全電子数を生に扱うことを避けることができる。

半無限系の左右電極に、ある有限な系 (本文で扱っているようなドット系) を結合させた状況を考え、左右電極のハミルトニアンを  $H_0 \equiv H_L + H_R$ 、Møller の散乱行列の演算子を

$$\Omega = \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{iHt/\hbar} e^{-iH_0t/\hbar} = \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{-iHt/\hbar} e^{iH_0t/\hbar} \quad (118)$$

と定義する。このように定義したものをを用いると漸近場の演算子 (in-coming field) は以下のように表現される。

$$\beta_{k\sigma r} = \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{iHt/\hbar} e^{-iH_0t/\hbar} a_{k\sigma r} e^{iH_0t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} = \Omega a_{k\sigma r} \Omega^\dagger \quad (119)$$

全系のハミルトニアン  $H$  は、孤立状態 (束縛状態) を持たないと仮定し (これは有限の系が完全に半無限系と結合されることを意味する)、 $H_0$  をドット演算子  $c_\sigma$  で表される束縛状態をもつハミルトニアンとすると、 $H\Omega = \Omega H_0$  という関係が成立し、 $\Omega$  はドットに関係する電子状態を消

減させる演算子として働く。この演算子の積、 $\Pi \equiv \Omega^\dagger \Omega$  は電極中の電子  $a_{k\sigma r}$  によって表される電子で成立する状態のみに作用する。それ故に演算子、 $\Pi = (1 - c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow})(1 - c_{\downarrow}^\dagger c_{\downarrow})$  は  $a_{k\sigma r}$  と交換する。ところで、初期状態  $\rho_0$  は電子数を  $N_r$ 、ドットの初期状態を  $\rho_c$  とすると、

$$\rho_0 \propto \rho_c \exp \left[ - \sum_r (H_r - \mu_r N_r) / T_r \right] \quad (120)$$

と記述できる。 $\rho_0$  と  $H_0$  は交換可能なので、定常状態は

$$\rho_+ = \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{-iHt/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} \rho_0 e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iHt/\hbar} \quad (121)$$

によって与えられ、Møller の散乱行列の演算子と  $\rho_+ = \Omega \rho_0 \Omega^\dagger$  という関係を持つ。規格化された場合の定常状態は

$$\rho_+ = \Omega \rho_0 \Omega^\dagger / \text{tr}(\Omega \rho_0 \Omega^\dagger) = \Omega \rho_0 \Omega^\dagger / \langle \Pi \rangle_0 \quad (122)$$

となる。 $\langle \dots \rangle_0$  は  $\text{tr}(\dots \rho_0)$  を表している。漸近場の演算子の非平衡定常状態での相関は、もとの電極の演算子と以下のように関係付けられる。

$$\begin{aligned} & \langle \beta_{k_1 \sigma_1 r_1}^\dagger \beta_{k_2 \sigma_2 r_2}^\dagger \beta_{k_3 \sigma_3 r_3} \beta_{k_4 \sigma_4 r_4} \rangle \\ &= \frac{\langle \Pi a_{k_1 \sigma_1 r_1}^\dagger \Pi a_{k_2 \sigma_2 r_2}^\dagger \Pi a_{k_3 \sigma_3 r_3} \Pi a_{k_4 \sigma_4 r_4} \Pi \rangle_0}{\langle \Pi \rangle_0} \\ &= \langle a_{k_1 \sigma_1 r_1}^\dagger a_{k_2 \sigma_2 r_2}^\dagger a_{k_3 \sigma_3 r_3} a_{k_4 \sigma_4 r_4} \Pi \rangle_0 / \langle \Pi \rangle_0 \\ &= \langle a_{k_1 \sigma_1 r_1}^\dagger a_{k_2 \sigma_2 r_2}^\dagger a_{k_3 \sigma_3 r_3} a_{k_4 \sigma_4 r_4} \rangle_0 \end{aligned}$$

最後の等式では初期状態  $\rho_0$  で  $a_{k\sigma r}$  と  $c_\sigma$  は互いに独立であることを使用した。従って、初期状態  $\rho_0$  が演算子  $a_{k\sigma r}$  に関して Wick の定理が成立するならば、 $\rho_+$  や  $\beta_{k\sigma r}$  に対しても同様に成立し、二点間相関関数に分離させることが可能であり、(27) 式のように非平衡定常状態での相関関数  $\langle \beta_{k\sigma r}^\dagger \beta_{k'\sigma' r'} \rangle$  が与えられる。

## 付録 E C\*代数法の応用—カーボンナノチューブ系への適用

C\*代数の方法を用いた計算は本研究で用いた AB リングに量子ドットを埋め込んだ系のみならず、他の量子系における電気伝導度の計算に適用することが可能である。本付録では例として、単層カーボンナノチューブにおける電気伝導度の計算を紹介する。非平衡定常状態の構成や漸近場の導出については本文及び付録 C、付録 D を参照のこと。

ここではキャップを考慮しない場合のアームチェア型、有限長単層ナノチューブにおける電気伝導を考察する。層状物質であるグラファイト層の原子面は六方格子であり、単層ナノチューブはこの二次元グラファイトシートをまるめたものとして考えることができる。ナノチューブは以下のような原子位置を表す基本格子ベクトルによって構造が決められる。

$$\begin{aligned} \vec{L}_{n,m}^{(1)} &= n\vec{\xi} + m\vec{\eta} \\ \vec{L}_{n,m}^{(2)} &= n\vec{\xi} + m\vec{\eta} + \vec{b} \end{aligned} \quad (123)$$

ここで  $n, m$  は整数であり、 $\vec{\xi} = (\sqrt{3}/2, 3/2)\vec{b}$ 、 $\vec{\eta} = (-\sqrt{3}/2, 3/2)\vec{b}$ 、 $\vec{b} = (0, b)$ 、 $b$  は最近接距離である。ナノチューブの電子状態を計算するために以下のようなタイトバインディングモデルを用いる。

$$H_c = -t \sum_{nm\sigma} \left\{ C_{nm\sigma}^{(1)\dagger} \left( C_{nm\sigma}^{(2)} + C_{n+1,m\sigma}^{(2)} + C_{n,m+1\sigma}^{(2)} \right) + \frac{\epsilon_0}{2} \sum_{i\sigma} C_{nm\sigma}^{(i)\dagger} C_{nm\sigma}^{(i)} + (\text{H.c.}) \right\} \quad (124)$$

$C_{nm\sigma}^{(i)}$  ( $i=1,2$ ) はサイト  $\tilde{L}_{n,m}^{(i)}$  の  $\pi$  電子の消滅演算子で、 $t$  は最近接間の電子のホッピングの強さ、 $\varepsilon_0$  はナノチューブにかけられたゲート電圧に依存する量である。クーロン相互作用はここでは考慮しないものとする。

アームチェア型ナノチューブの場合、二次元グラフィイトシートのサイト  $\tilde{L}_{n,m}^{(i)}$  を整数倍だけずらした位置、 $\tilde{L}_{n+M,m+M}^{(i)}$  ( $M \in \mathbf{N}$ ) と重ねることによって電子構造を決定することができる。つまり、電子構造は周期境界条件  $C_{nm\sigma}^{(i)} = C_{n+M,m+M,\sigma}^{(i)}$  を課すことによって得られる。この境界条件を用いると、長さ  $(\sqrt{3}/2)bN$  のナノチューブのハミルトニアンは以下のように記述できる。

$$H_c = -t \sum_{l=0}^N \sum_{l'=0}^{M-1} \left[ e_{ll'\sigma}^{(1)\dagger} e_{l'l\sigma}^{(2)} \{1 + e^{-ia_{l'}} (e^{i\theta_l} + e^{-i\theta_l})\} + \frac{\varepsilon_0}{2} \sum_i e_{ll'\sigma}^{(i)\dagger} e_{l'l\sigma}^{(i)} + (\text{H.c.}) \right] \quad (125)$$

ここで  $a_{l'} = \pi l'/M$ ,  $\theta_l = \pi(l+1)/(N+2)$  であり、 $e_{ll'\sigma}^{(i)}$  は新たに定義した消滅演算子であり、 $e_{ll'\sigma}^{(i)} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^{M-1} e^{ia_{l'}(n+2m)} S_{ln} C_{n+m,m\sigma}^{(i)}$  である。また、 $S_{nl} = \sqrt{2/(N+2)} \sin\{(n+1)\theta_l\}$  は次の条件を満たす。

$$\sum_{l=0}^N S_{nl} S_{lm} = \delta_{nm} \quad (126)$$

以下の変換をすると、

$$\begin{aligned} f_{ll'\sigma}^{(+)} &= P_{ll'} e_{ll'\sigma}^{(1)} + Q_{ll'} e_{ll'\sigma}^{(2)} \\ f_{ll'\sigma}^{(-)} &= -Q_{ll'}^* e_{ll'\sigma}^{(1)} + P_{ll'}^* e_{ll'\sigma}^{(2)} \end{aligned} \quad (127)$$

ハミルトニアン  $H_c$  は対角化することができる。

$$H_c = \sum_{l=0}^N \sum_{l'=0}^{M-1} \sum_{\gamma=\pm} \varepsilon_{ll'}^{(\gamma)} f_{ll'\sigma}^{(\gamma)\dagger} f_{ll'\sigma}^{(\gamma)} \quad (128)$$

$\varepsilon_{ll'}^{(\gamma)}$  はナノチューブの電子エネルギーであり、電子状態は

$$\varepsilon_{ll'}^{(\gamma)} = -\gamma t (1 + 4 \cos a_{l'} \cos \theta_l + 4 \cos^2 \theta_l)^{1/2} \quad (129)$$

と決定される。エネルギー状態は  $a_{l'} = 0, \theta_l = 2\pi/3$  で、 $\varepsilon_{ll'}^{(\gamma)} = 0$  となり、この点でエネルギーギャップが消滅するのでアームチェア型のナノチューブは金属の性質を示す。

これまでは、ナノチューブ内の電子状態について記述したが、ここからは電極とナノチューブが結合した状態を考えていくことにする。有限長のナノチューブを左右二つの電極に結合させることを考え、左右電極は半無限系のものを用いる。全ハミルトニアンは

$$H = H_{el} + H_c + V \quad (130)$$

で与えられる。第1項目の  $H_{el} = \sum_{\sigma} \int dk \omega_{kr} a_{kr\sigma}^{\dagger} a_{kr\sigma}$ , ( $r=L,R$ ) は左右の電極中の電子状態を表し、 $\omega_{kr}$  は電子のエネルギーで  $\omega_{kL} = \omega_{kR} + eV \propto k^2$  と表される。 $V$  は電極にかけられたバイアス電圧である。第2項  $H_c$  ナノチューブ内の電子状態を表すハミルトニアンであり、先に導出した (128) 式である。最後の項、

$$V = \sum_{l=0}^N \sum_{l'=0}^{M-1} \sum_{\gamma \in \pm, r \in L,R} \{h_{ll'}^{(\gamma,r)} a_{\sigma}^{(r)\dagger}(u) f_{ll'\sigma}^{(\gamma)} + (\text{H.c.})\} \quad (131)$$

は電極とナノチューブとの結合を表す。第3項の係数は  $a_{\sigma}^{(r)}(u) = \int dk u_{kr} a_{k\sigma r}$  のように表され、 $h_{ll'}^{(\gamma,r)}$  は以下のように与えられる。

$$\begin{aligned} h_{ll'}^{(\pm,L)} &= \frac{S_{0l}}{\sqrt{2M}} \sum_{m=0}^{M-1} \left( \pm U_{mL}^{(1)} e^{-i\tau_{ll'}^{(-)}} + U_{mL}^{(2)} e^{-i\tau_{ll'}^{(+)}} \right) e^{\mp i\kappa_{ll'}} \\ h_{ll'}^{(\pm,R)} &= \frac{S_{Nl}}{\sqrt{2M}} \sum_{m=0}^{M-1} \left( \pm U_{mR}^{(1)} e^{-i\tau_{ll'}^{(-)}} + U_{mR}^{(2)} e^{-i\tau_{ll'}^{(+)}} \right) e^{\mp i\tilde{\kappa}_{ll'}} \end{aligned} \quad (132)$$

それぞれ、 $\tau_{ll'}^{(\pm)} = 2a_{ll'}m \pm \kappa_{ll'}$ ,  $\tilde{\kappa}_{ll'}^{(\pm)} = \kappa_{ll'} \pm a_{ll'}N$ ,  $\kappa_{ll'} = \frac{\delta_{ll'}}{2}$  である。 $\delta_{ll'}$  は位相を表しており、 $-(1 + e^{-ia_{ll'}}(e^{i\theta_{ll'}} + e^{-i\theta_{ll'}}))$  である。積、 $U_{mr}^{(i)} \cdot u_{kr}$  はナノチューブの周辺のサイトと電極間のトンネルの強さを表す。

AB リングに量子ドットを埋め込んだ系の場合の計算と同様に (付録 C 及び付録 D を参照)、ハイゼンベルグの運動方程式から漸近場を導出する。漸近場は

$$\begin{aligned} \beta_{k\sigma r} &= a_{k\sigma r} + \sum_{l=0}^N \sum_{l'=0}^{M-1} \sum_{\gamma \in \pm} \left\{ \frac{u_{kr}^*}{\Lambda(\omega_{kr})} \frac{\chi_{ll'}^{(r)} f_{ll'\sigma}^{(\gamma)}}{\omega_{kr} - \epsilon_{ll'}^{(\gamma)} - \epsilon_0} \right. \\ &\quad \left. + \int dk' \left( \frac{u_{k'r} u_{kr}^*}{\omega_{kr} - \omega_{k'r} - i0} \frac{\eta_{ll'}^{(r)}(\omega_{kr}) a_{k'\sigma r}}{\Lambda(\omega_{kr})} + \frac{u_{k'r} u_{kr}^*}{\omega_{kr} - \omega_{k'r} - i0} \frac{g_{r\bar{r}}(\omega_{kr}) a_{k'\sigma \bar{r}}}{\Lambda(\omega_{kr})} \right) \right\} \end{aligned} \quad (133)$$

と求めることができ、それぞれ、

$$\begin{aligned} \eta_{ll'}^{(r)}(\omega_{kr}) &= v(\omega_{kr}) M_{\bar{r}}(\omega_{kr}) + g_{rr}(\omega_{kr}), \chi_{ll'}^{(r)}(\omega_{kr}) = h_{ll'}^{(\gamma,r)}(1 - g_{r\bar{r}} M_{\bar{r}}(\omega_{kr})) + h_{ll'}^{(\gamma,\bar{r})} g_{r\bar{r}} M_{\bar{r}}(\omega_{kr}), \\ v(x) &= |g_{LR}(x)|^2 - g_{LL}(x) - g_{RR}(x), \Lambda(x) = 1 - (g_{LL} M_L(x) + g_{RR} M_R(x)) - v(x) M_L(x) M_R(x), \\ g_{\lambda\bar{\lambda}}(x) &= \sum_{ll' \gamma} \frac{h_{ll'}^{(\gamma,r)} h_{ll'}^{(\gamma,\bar{r})*}}{x - \epsilon_{ll'}^{(\gamma)} - \epsilon_0}, M_r(x) = \int d\tilde{k} \frac{|u_{\tilde{k}r}|^2}{x - \omega_{\tilde{k}r} - i0} \end{aligned}$$

と決定される。上記では  $\bar{L} = R, \bar{R} = L$  とした。

左電極からナノチューブを介して右電極に流れる電流の演算子は、左電極の電子数演算子  $n_{kL} = \sum_{\sigma} \int dk a_{k\sigma L}^{\dagger} a_{k\sigma L}$  の時間微分から導出することができる。非平衡定常電流は

$$\langle \hat{J} \rangle = \frac{e}{h} \sum_{l=0}^N \sum_{l'=0}^{M-1} \sum_{\gamma \in \pm} \left\{ h_{ll'}^{(\gamma,L)} \langle a_{\sigma}^{(L)}(u)^{\dagger} f_{ll'\sigma}^{(\gamma)} \rangle + (\text{c.c.}) \right\} \quad (134)$$

と求められる。上式の消滅演算子、 $a_{\sigma}^{(L)}(u), f_{ll'\sigma}^{(\gamma)}$  を先ほど求めた漸近場の演算子  $\beta_{k\sigma r}$  を用いて展開し、本文中に示した二点間相関関数 (27) 式を用いると、定常電流を計算することができる。

$$\langle \hat{J} \rangle = -\frac{e}{h} \int_{\mu_c}^{\infty} d\epsilon T(\epsilon) \{F_L(\epsilon) - F_R(\epsilon)\} \quad (135)$$

但し、 $\mu_c = \max\{\omega_{kL}, \omega_{kR}\}_{k=0}$  である。定常電流は電子間相互作用を考慮しない場合の量子ドット複合系の場合と同様に、ランダウアー公式に一致する。透過確率は

$$T(\epsilon) = \frac{2\Gamma_L \Gamma_R}{|\Lambda(\epsilon)|^2} |g_{LR}(\epsilon)|^2$$

のように求められる。 $\Gamma_r(\epsilon) = 2\pi \int dk u_{kr}^2 \delta(\epsilon - \omega_{kr})$  は電極とナノチューブの結合定数であり、他の記号は先に定義したものと同様である。以上見てきたように、AB リングと量子ドットの複合系のみならず、カーボンナノチューブなどの量子系を対象としても漸近場の演算子を導出し、非平衡定常状態を構成することによって電気伝導度を導出することができる。

## 参考文献

- [1] A. Yacoby, M. Heiblum, D. Mahalu and H. Shtrikman: Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 4047.
- [2] U. Fano: Phys. Rev. **124** 1866 (1961).
- [3] H. Aikawa, K. Kobayashi, A. Sano, S. Katsumoto and Y. Iye: Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 176802.
- [4] H. Aikawa, K. Kobayashi, A. Sano, S. Katsumoto and Y. Iye: Preprint.
- [5] W. Hofstetter, J. König and H. Schoeller: Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 156803.
- [6] K. Kobayashi, H. Aikawa, S. Katsumoto and Y. Iye: Phys. Rev. Lett. **88** (2002) 256806.
- [7] 物理学論文選集Ⅱ メゾスコピック系、川畑有郷・川村清責任編集、社団法人 日本物理学会、1994年印刷・発行。
- [8] R. Landauer: IBM J. Res. & Dev. **1** (1957) 223.
- [9] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer and S. Pinhas: Phys. Rev. B **31** (1985) 6207.
- [10] B. J. van Wess, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel and C. T. Foxon: Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 848.
- [11] J. Göres, D. Goldhaber-Gordon, S. Heemeyer and M. A. Kastner: Phys. Rev. B **62** (2000) 2188.
- [12] 相川恒、小林研介、中西毅：日本物理学会誌 2004 vol.59、No.10.
- [13] J. Kondo, Prog. Theor. Phys. **32** (1964) 37.
- [14] D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav and M. A. Kastner: Nature **391** (1998) 1566.
- [15] D. Goldhaber-Gordon, J. Göres, M. A. Kastner, H. Shtrikman, D. Mahalu and D. Goldhaber-Gordon: Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 5225.
- [16] S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp and L. P. Kouwenhoven: Science **281** (1998) 540.
- [17] W. G. van der wiel, S. De Franceschi, T. Fujisawa, J. M. Elzerman, S. Tarucha and L. P. Kouwenhoven: Science **289** (2000) 2105.
- [18] S. Sasaki, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, W. G. van der wiel, M. Eto, S. Tarucha and L. P. Kouwenhoven: Nature **405** (2000) 764.
- [19] S. Sasaki, S. Amaha, N. Asakawa, M. Eto and S. Tarucha: Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 17205.
- [20] K. Kawamura, T. Aono: Jpn. J. App. Phys. **36** (1997) 3951.
- [21] T. Aono, M. Eto and K. Kawamura: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 1860.
- [22] S. De Franceschi, R. Hanson, W. G. van der wiel, J. M. Elzerman, J. J. Wijpkema, T. Fujisawa: Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 156801.
- [23] T. Fujii, K. Ueda: Physica E **22** (2004) 489.



- [24] T. Fujii, K. Ueda: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) pp.127-135.
- [25] A. Rosch, J. Paaske, J. Kroha and P. Wölfle: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) pp.118-126.
- [26] R. Aguado and D. C. Langreth: Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 1946.
- [27] N. J. Craig, J. M. Taylor, E. A. Lester, C. M. Marcus, M. P. Hanson and A. C. Gosard: Science **304** (2004) 565.
- [28] P. Simon, R. Lopez and Y. Oreg: Phys. Rev. Lett. **94** (2005) 086602.
- [29] M. G. Vavilov and L. I. Glazman: Phys. Rev. Lett. **94** (2005) 086805.
- [30] M. Sato, H. Aikawa, K. Kobayashi, S. Katsumoto and Y. Iye: cond-mat/0410062.
- [31] 佐藤政寛：修士論文（2005年1月）東京大学大学院理学系研究科
- [32] 相川恒：学位論文（2004年12月）東京大学大学院理学系研究科
- [33] S. Katsumoto, M. Sato, H. Aikawa and Y. Iye: Preprint.
- [34] S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp and L. P. Kouwenhoven: Nature **281** (1998) 540.
- [35] F. D. M. Haldane: Phys. Rev. Lett. **40** (1978) 416.
- [36] T. A. Costi and A. C. Hewson: Phil. Mag. B **65** (1992) 1165.
- [37] W. Izumida, O. Sakai and Y. Shimizu: J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 717.
- [38] W. Izumida, O. Sakai and Y. Shimizu: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 2444.
- [39] W. Izumida, O. Sakai and Y. Shimizu: Physica B **259-261** (1999) 215.
- [40] O. Bratteli and D.W. Robinson: *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics* vol.1 (Springer, New York, 1987); vol.2, (Springer, New York, 1997).
- [41] H. Araki: *Mathematical Theory of Quantum Fields* (1999) Oxford Science Publications.
- [42] 荒木不二洋：現代物理学叢書 量子場の数理 (2001) 岩波書店.
- [43] W. Thirring: *Quantum Mathematical Physics Atoms, Molecules and Large Systems* (2002) Springer.
- [44] 田崎秀一：「C\*代数の方法による量子1次元導体の非平衡定常状態の構成」京大基研研究会報告「熱場の量子論とその応用」素粒子論研究 vol.103-1(2001年4月号)、pp.A196-A201.
- [45] H. Spohn and J. L. Lebowitz: Commun. math. Phys. **54** (1977) 97.
- [46] S. Tasaki: Nonequilibrium Stationary States of Noninteraction Electrons in a One-dimensional Lattice, Chaos, Solitons and Fractals **12** (2001) pp.2657-2674.
- [47] S. Tasaki: Current Fluctuations in Nonequilibrium Steady States for a One-Dimensional Lattice Conductor, in *Quantum Information III*, eds. T. Hida and K. Saito (2001) pp.157-176.

- [48] S. Tasaki: On Steady-States Entropy Production of A One-Dimensional Lattice Conductor, 数理解析研究所講究録 1227 巻、pp.199-208、2001 年 08 号
- [49] J. Fröhlich, M. Merkli, D. Ueltschi: *Ann. Henri Poincaré* **4**, 897 (2003).
- [50] J. Takahashi and S. Tasaki: *J. Phys. Soc. Jpn.* **74** (2005) Suppl. pp. 261-264.
- [51] S. Tasaki and J. Takahashi: cond-mat/0606259.
- [52] J. Takahashi and S. Tasaki: *Physica E* (2006) in press.
- [53] B. Kubala and J. Köning: *Phys. Rev. B* **65** (2002) 245301.
- [54] A. Ueda, I. Baba, K. Suzuki and M. Eto: *J. Phys. Soc. Jpn.* **72** (2003) Suppl. A pp.157-158.
- [55] Y. Zhu, Q. Sun and T. Lin: cond-mat/02029456.
- [56] G. Kirczenow: *Phys. Rev. B* **50** (1994) 1649.
- [57] A. Yacoby, R. Schuster and M. Heiblum: *Phys. Rev. B* **53** (1996) 9538.
- [58] R. Schuster, E. Buks, M. Heidlum, D. Mahalu, V. Umansky and H. Shtrikman: *Nature* **385** (1997) 417.
- [59] C. Bruder, R. Fazio and H. Schoeller: *Phys. Rev. Lett.* **76** (1995) 114.
- [60] Y. Oreg and Y. Gefen: *Phys. Rev. B* **55** (1997) 13726.
- [61] G. Hackenbroich and H. Weidenmüller: *Europhys. Lett.* **38** (1997) 129.
- [62] J. Wu, B.-L. Gu, H. Chen, W. Duan and Y. Kawazoe: *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 1952.
- [63] H.-W. Lee: *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 2358.
- [64] K. Kang: *Phys. Rev.* **59** 4608 (1999).
- [65] T. Taniguchi and M. Büttiker: *Phys. Rev. B* **60** (1999) 13814.
- [66] T. Nakanishi, K. Terakura and T. Ando: *Phys. Rev. B* **69** (2004) 115307.
- [67] G. H. Ding and T. K. Ng: *Phys. Rev. B* **56** (1997) R15 521.
- [68] R. López and D. Sánchez: *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003) 116602.
- [69] R. López, R. Aguado and G. Platero: *Phys. Rev. B* **69** (2004) 235305.
- [70] B. Dong and X. L. Lei: *J. Phys. Condens. Matter* **14** (2002) 4963.
- [71] Y. Imry: *Introduction to mesoscopic physics*, Oxford University Press, New York, N. Y. USA, 1997.
- [72] A. Shimizu and M. Ueda: *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992) 1403.
- [73] Z. Ma :*Phys. Rev. B* **69** (2004) 045302.

- [74] R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. **12** (1957) 570.
- [75] I. Ojima, H. Hasegawa and M. Ichiyangi: J. Stat. Phys. **50** (1988) 633.
- [76] I. Ojima: J. Stat. Phys. **56** (1989) 203.
- [77] V. Jakšić and C.-A. Pillet: Commun. Math. Phys. **217** (2001) 285.
- [78] H. Qian: Phys. Rev. E **63** (2001) 042103.
- [79] D.N. Zubarev, *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics*, (Consultants, New York, 1974).
- [80] G. Kotliar and A. E. Ruckenstein: Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 1362.
- [81] B. Dong and X. L. Lei: J. Phys. Condens. Matter **13** (2001) 9245.
- [82] B. Dong and X. L. Lei: Phys. Rev. B **63** (2001) 235306.
- [83] B. Dong and H. L. Cui: Semicond. Sci. Technol. **19** (2004) No.4 S14.
- [84] E. Vernel, N. Sandler, S. E. Ulloa and E. V. Anda: Preprint submitted to Physica E.
- [85] B. Dong and X. L. Lei: Phys. Rev. B **65** (2002) 241304(R).
- [86] B. Dong, G. H. Ding, H. L. Cui and X. L. Lei: Europhys. Lett. **69** (3) (2005) 424.
- [87] J. Takahashi, S. Tasaki: J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) in press, cond-mat/0603337.
- [88] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124** (1961) 41.
- [89] P. A. M. Dirac: Canad. J. Math. **2** (1950) 129.
- [90] P. A. M. Dirac: *Lectures on Quantum Field Theory* (Belfer Graduate School of Science, Yeshiva University, New York, 1966).
- [91] P. A. M. Dirac: *Lectures on Quantum Mechanics* (Belfer Graduate School of Science, Yeshiva University, New York, 1964).
- [92] C. Karrasch, T. Enss and V. Meden: cond-mat/0603510 (2006)
- [93] B. R. Bulka and P. Stefański: Phys. Rev. Lett. **28** (2001) 5128.
- [94] L. Y. Chen and C. S. Ting: Phys. Rev. B **43** (1991) 4534.
- [95] J. Kim, J.-R. Kim, J.-O. Lee, J. W. Park, H. M. So, N. Kim, K. Kim, K.-H. Yoo and J.-J. Kim: Phys. Rev. Lett. **90** (2003) 166403.
- [96] B. Babić and C. Schönenberger: Phys. Rev. B **70** (2004) 195408.
- [97] G. Kim, S. B. Lee, T. S. Kim and J. Ihm: Phys. Rev B **71** (2005) 205415.
- [98] M. Valle, C. Tejedor and G. Cuniberti: Phys. Rev. B **71** (2005) 125306.
- [99] Y. Aharonov and D. Bohm: Phys. Rev. **115** (1963) 485.

- [100] 川端有郷：メソスコピック系の物理学 (1997) 培風館
- [101] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, (Cambridge University Press, 1995).
- [102] R. A. Webb, S. Washburn, C. P. Umbach and R. B. Laibowitz: Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 2696.